



**You have downloaded a document from
RE-BUS
repository of the University of Silesia in Katowice**

Title: Własności struktury złożonej z kropki i pierścienia kwantowego

Author: Barbara Kędzierska

Citation style: Kędzierska, Barbara. (2018). Własności struktury złożonej z kropki i pierścienia kwantowego. Praca doktorska. Katowice : Uniwersytet Śląski

© Korzystanie z tego materiału jest możliwe zgodnie z właściwymi przepisami o dozwolonym użytku lub o innych wyjątkach przewidzianych w przepisach prawa, a korzystanie w szerszym zakresie wymaga uzyskania zgody uprawnionego.



UNIWERSYTET ŚLĄSKI
W KATOWICACH



Biblioteka
Uniwersytetu Śląskiego



Ministerstwo Nauki
i Szkolnictwa Wyższego

UNIwersytet śląski w Katowicach
Wydział Matematyki Fizyki i Chemii
Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego

Własności struktury złożonej z kropki i pierścienia kwantowego

Barbara Kędzierska

Rozprawa doktorska z dziedziny nauk fizycznych

Promotor: prof. Maciej M. Maśka

Promotor pomocniczy: dr in. Anna Gorczyca - Goraj

Zakład Fizyki Teoretycznej

8 maja 2018

UNIwersytet Śląski w Katowicach

Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego

Wydział Matematyki Fizyki i Chemii

Streszczenie

Rozprawa doktorska z dziedziny nauk fizycznych pt.
Własności struktury złożonej z kropki i pierścienia kwantowego

Barbara Kędzierska

Współczesna technologia pozwala na otrzymywanie nanoukładów o niemal dowolnej symetrii oraz zastosowanie ich w różnych gałęziach nauki i gospodarki. Tematem rozprawy są własności struktury złożonej z kropki kwantowej otoczonej pierścieniem (DRN - *Dot Ring Nanostructure*).

W pierwszym rozdziale omówione zostaną technologie otrzymywania nanoukładów i ich zastosowanie w przemyśle. Rozdział ten zawiera także przegląd literatury dotyczącej DRN oraz dorobku naukowego autorki.

Drugi rozdział stanowi wprowadzenie do inżynierii funkcji falowej w DRN. Porównane zostaną metody obliczeniowe, pozwalające na uzyskanie funkcji falowych struktury będącej tematem rozprawy.

Trzeci rozdział poświęcony jest relaksacji spinowej i orbitalnej. Przedstawiony zostanie mechanizm odpowiedzialny za relaksację oraz wpływ parametrów układu na jej szybkość.

Tematem czwartego i piątego rozdziału jest transport ładunku przez układ. Omówiona zostanie zależność wysokości amplitudy prądu od parametrów układu.

Spis treści

Streszczenie	i
Spis rysunków	iv
1 Kropki i pierścienie kwantowe	1
1.1 Streszczenie dorobku	1
1.1.1 DRN w literaturze	3
1.2 Kropki i pierścienie kwantowe - wstęp	4
1.3 Model stałego oddziaływania	5
1.3.1 Układ dwóch kropek kwantowych	7
1.4 Otrzymywanie nanoukładów	8
1.4.1 Epitaksjalny wzrost	8
1.4.2 Samozorganizowany wzrost struktur	10
1.4.3 Epitaksja kropłowa	12
1.4.4 Litografia wiązki elektronowej	13
1.4.5 Litografia koloidalna	14
1.4.6 Układ elektrod	15
1.4.7 Nanodrutki wielowarstwowe - CMS	17
1.4.8 Porównanie metod otrzymywania struktur	18
1.5 Zastosowanie kropek kwantowych	19
1.5.1 Elektronika i optyka	20
1.5.2 Biologia i medycyna	22
2 Dot Ring Nanostructure	23
2.1 Dot Ring Nanostructure - potencjał definiujący	27
2.2 DRN - inżynieria funkcji falowych	29
2.2.1 Wpływ parametrów bariery wewnętrznej na kształt funkcji falowych	30
2.2.2 Wpływ potencjału kropki na kształt funkcji falowych	32
2.3 Porównanie metod obliczeniowych	34
2.3.1 Metoda Numerova	35
2.3.2 Macierzowa postać równań	37
2.3.3 Pakiet Kwant	39
2.3.4 Wnioski z porównania	40

3	Relaksacja spinowa i orbitalna	42
3.1	Relaksacja spinowa	42
3.1.1	Wpływ kształtu bariery na szybkość relaksacji	45
3.1.2	Wpływ potencjału kropki na szybkość relaksacji	46
3.2	Relaksacja orbitalna	47
3.2.1	Wpływ grubości układu na szybkość relaksacji	49
3.2.2	Wpływ potencjału kropki na szybkość relaksacji	51
3.2.3	Wnioski	51
4	Transport ładunku	53
4.1	Równania ruchu	57
4.1.1	Metoda Bardeena	59
4.1.2	Porównanie wyników z pakietem Kwant	62
4.2	Symetryczne bariery	63
4.2.1	Zwiększanie liczby stanów	66
4.2.2	Stany niestacjonarne	67
4.3	Niesymetryczne bariery	70
4.3.1	$\Gamma_{\max} \gg w$	73
4.3.2	$\Gamma_{\max} \ll w$	74
4.3.3	$\Gamma_{\max} \simeq w$	76
4.3.4	Zwiększanie liczby stanów	77
4.3.5	Stany niestacjonarne	78
5	DRN w polu magnetycznym	79
5.1	Wpływ czynnika żyromagnetycznego na potencjał definiujący	81
5.2	Transport ładunku	83
5.2.1	Kropka i pierścień wykonane z jednego materiału	84
5.2.2	Kropka i pierścień wykonane z różnych materiałów	85
	Podsumowanie	93
A	Metody obliczeniowe	94
B	Absorpcja fotonów	99
C	Korelacje elektronowe	101
	Bibliografia	105

Spis rysunków

1.1	Schemat poprzecznej i podłużnej kropki kwantowej	5
1.2	Diagram przedstawiający zależność liczby elektronów w poszczególnych kropkach w zależności od napięcia na bramkach	7
1.3	Widmo RHEED jako funkcja czasu	9
1.4	Schemat samorganizowanego wzrostu struktur	11
1.5	Schemat samorganizowanego wzrostu	11
1.6	AFM: Kolejne etapy otrzymywania DRN dzięki DE	12
1.7	Schemat układu EBL z CL	13
1.8	Otrzymywanie struktur za pomocą litografii koloidalnej	15
1.9	Schemat kropki kwantowej z przyłączonymi elektrodami	16
1.10	Układ elektrod do wytworzenia potencjału DRN	16
1.11	Rozwiązanie równania Laplacea dla układu dwóch elektrod	17
1.12	Schemat CMS	18
1.13	Schemat kwantowego panelu słonecznego	20
1.14	Schemat lasera opartego na kropkach kwantowych	21
1.15	Schemat ekranu QLED	21
1.16	Obrazowanie komórek in vivo za pomocą kropek kwantowych	22
2.1	Funkcje falowe i czas relaksacji dla układów o różnej geometrii	25
2.2	Podwójny pierścień i kropka otoczona pierścieniem	26
2.3	Czas relaksacji dla układów koncentrycznych	27
2.4	Schemat przekroju poprzecznego DRN	27
2.5	Funkcje falowe dla różnych wartości V_0	31
2.6	Funkcje falowe dla różnych wartości V_{QD}	32
2.7	Widmo energetyczne jako funkcja V_{QD}	33
2.8	Funkcje falowe otrzymane metoda Numerova dla $V_{QD} = 0$	36
2.9	Funkcje falowe otrzymane przy użyciu algorytmu Lanczosa dla $V_{QD} = 0$	38
2.10	Funkcje falowe otrzymane przy użyciu pakietu Kwant dla $V_{QD} = 0$	39
2.11	Funkcja falowa stanu podstawowego dla słabo, umiarkowanie i silnie sprzężonego DRN z elektrodami	40
3.1	Schemat przedstawiający mechanizm relaksacji spinowej za pośrednictwem sprzężenia spin-orbita	43
3.2	Schemat przedstawiający wpływ kształtu i położenia bariery na czas relaksacji	45

3.3	Szybkość relaksacji spinowej jako funkcja V_{QD}	46
3.4	Wykres przedstawiający zależność emisji fononów od kąta	49
3.5	Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji od grubości próbki dla $V_{\text{QD}} = -6$ meV i $V_{\text{QD}} = 6$ meV	50
3.6	Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji ze stanu 01 do stanu 00 od grubości próbki dla różnych V_{QD}	50
3.7	Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji od V_{QD}	52
4.1	Schemat poziomów oraz wykres zależności prądu od napięcia na bramce	53
4.2	Schemat i diagram wysokiego <i>bias window</i>	54
4.3	Potencjał elektrochemiczny i odpowiadające mu stany w zależności od napięcia na bramkach	55
4.4	Układ wielu DRN z elektronem w części kropkowej i pierścieniowej	56
4.5	Schematyczny zapis procesów wpływających na ρ_j	57
4.6	Schematyczne przedstawienie zależności częstotliwości tunelowania od potencjału definiującego strukturę	59
4.7	Geometria układu DRN i elektrody wykorzystana do obliczeń częstotliwości tunelowania	60
4.8	Częstotliwość tunelowania jako funkcja V_{QD}	62
4.9	Pik przewodnictwa dla $V_{\text{QD}} = 1$ meV.	63
4.10	Porównanie częstości tunelowania otrzymanej przy zastosowaniu podejścia Bardeena i pakietu Kwant	63
4.11	Schematyczny zapis procesów transportu jednoelektronowego	64
4.12	Prąd jako funkcja potencjału V_{QD} , funkcje falowe na panelach dla poszczególnych punktów	65
4.13	Charakterystyka prądowo-napięciowa DRN dla różnych wysokości bariery	66
4.14	Prąd płynący przez DRN jako funkcja V_{QD} dla różnej liczby stanów	67
4.15	Obsadzenie stanu podstawowego w DRN i różnica potencjałów jako funkcja czasu	68
4.16	Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego oraz całkowity prąd dla $V_{\text{QD}} = -5$ meV	69
4.17	Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego oraz całkowity prąd dla $V_{\text{QD}} = -1$ meV	70
4.18	Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego oraz całkowity prąd dla $V_{\text{QD}} = 5$ meV	70
4.19	Schemat działania prostownika	73
4.20	Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{\text{max}} \gg w$	74
4.21	Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{\text{max}} \ll w$	75
4.22	Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{\text{max}} \simeq w$	76

4.23	Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów uwzględniający obecność trzech stanów	77
4.24	Obsadzenie poszczególnych stanów i prąd dla kierunku przewodzenia i zaporowego	78
5.1	Czynniki żyromagnetyczne dla wybranych półprzewodników III-V grupy	80
5.2	Przekrój poprzeczny modelowego potencjału definiującego i energia stanu podstawowego bez pola magnetycznego.	81
5.3	Przekrój poprzeczny potencjału definiującego i energia stanu podstawowego, dla struktury wykonanej z jednolitego materiału	82
5.4	Przekrój poprzeczny potencjału definiującego i energia stanu podstawowego dla DRN z niejednolitego materiału	83
5.5	Charakterystyka prądowo-napięciowa DRN w polu magnetycznym	85
5.6	Spektrum energetyczne dla DRN wykonanego z różnych materiałów w polu magnetycznym	88
5.7	Schemat stanów biorących udział w transporcie dla PDC	89
5.8	Natężenie prądu i przewodnictwo różniczkowe dla układu wykazującego PDC	89
5.9	Schemat stanów biorących udział w transporcie dla NDC	90
5.10	Natężenie prądu i przewodnictwo różniczkowe dla układu wykazującego NDC	90
5.11	Spektrum układu wykonanego z InGaAs/InAs	91
5.12	Natężenie prądu w funkcji V_{SD} i przewodnictwo różniczkowe	92
5.13	Natężenie prądu jako funkcja V_{SD} dla spinowo spolaryzowanej i niespolaryzowanej elektrody	92
B.1	Przekrój czynny jako funkcja V_{QD} dla różnych wartości V_0	100
C.1	Spektrum energii wieloelektronowych stanów	102
C.2	Profile gęstości elektronowych dla różnych wartości V_{QD}	103

Rozdział 1

Kropki i pierścienie kwantowe

1.1 Streszczenie dorobku

Rozprawa dotyczyć będzie właściwości fizycznych struktury złożonej z kropki kwantowej otoczonej pierścieniem. Jej akronim (DRN) pochodzi z języka angielskiego (*Dot - Ring - Nanostructure*) i pod tą nazwą była prezentowana w publikacjach, wystąpieniach i niniejszej rozprawie. Pomysłodawczynią struktury była profesor Elżbieta Zipper, a w skład grupy obliczeniowej wchodził profesor Maciej Maśka oraz doktor Marcin Kurpas. Pierwsza publikacja dotycząca DRN pochodzi z 2011 roku i dotyczy relaksacji spinowej w złożonych układach pierścieni oraz kropki otoczonej pierścieniem. Rok później w czasopiśmie *New Journal of Physics* przedstawiono ideę inżynierii funkcji falowej w oparciu o układ DRN oraz potencjalne korzyści wynikające z skomplikowanej budowy tego układu: kontrolę absorpcji fotonów (dodatek [B](#)) i czasu relaksacji spinowej (rozdział [3](#)). W 2012 roku dołączyłam do grupy, która wkrótce została poszerzona o kolejne osoby: doktor Annę Gorczycę-Goraj oraz Iwonę Janus-Zygmunt. W trakcie studiów doktoranckich przeprowadziłam obliczenia w oparciu o które powstało 5 opublikowanych prac w czasopismach naukowych, 5 posterów zaprezentowanych na międzynarodowych konferencjach oraz jedno ustne wystąpienie na konferencji CCDS (*Correlations and Coherence at Different Scales*) w 2016 roku.

Swoją pracę rozpoczęłam od stworzenia algorytmu rozwiązującego równanie Schrödingera dla wskazanej struktury wykorzystując metody Numerova oraz Lanczosa. Otrzymane wyniki pozwoliły lepiej zrozumieć naturę struktury i zachowanie funkcji falowych w zależności od różnych parametrów i w oparciu o nie wyliczyć wpływ kształtu bariery oraz potencjału dna kropki kwantowej na szybkość relaksacji spinowej otrzymanej metodą epitaksji kropkowej (w odróżnieniu od wyliczonych uprzednio danych dla DRN otrzymanego dzięki zastosowaniu układu elektrod), co zostało opublikowane w 2014 roku. Kolejnym etapem było zbadanie przepływu ładunku przez strukturę. Bazując na przybliżeniu Bardeena oszacowano ogólny wpływ rozmieszczenia funkcji falowych na częstość tunelowania i transport. Razem z proponowanym zastosowaniem wyniki zaprezentowano na posterze oraz w publikacji. Praca uwzględniająca bardziej szczegółowe rachunki (ilościowe wyniki i dokładny wpływ parametrów kształtujących potencjał definiujący na transport) wraz z nowym potencjalnym zastosowaniem, a także wyliczenie relaksacji orbitalnej pojawiła się w 2015 roku. Wyniki zostały zaprezentowane także na konferencjach w formie posterów i wystąpienia. Ostatni rok spędziłam badając własności DRN otrzymanego przy pomocy epitaksji kropkowej/litografii koloidalnej, a także DRN opartego o CMS w polu magnetycznym, które zostały opublikowane w 2018 roku.

Praca była możliwa dzięki stypendiom udzielonym w ramach projektów ŚWI-DER i PIN oraz wsparciu grantu DEC-2013/11/B/ST3/00824. W ich ramach wzięłam udział w szkoleniu z nanoukładów pod opieką profesora Tadeusza Domańskiego na uniwersytecie im. Mari Skłodowskiej-Curie w Lublinie oraz odbyłam staż na Uniwersytecie w Le-Mans badając nierównowagowy transport ładunku, gdzie moim opiekunem był profesor Antoine Khater. W ramach zgłębiania wiedzy o nano-układach uczestniczyłam w szkole letniej organizowanej przez ICTP (*International Centre of Theoretical Physics* w Trieście), której tematem były silnie skorelowane układy elektronowe.

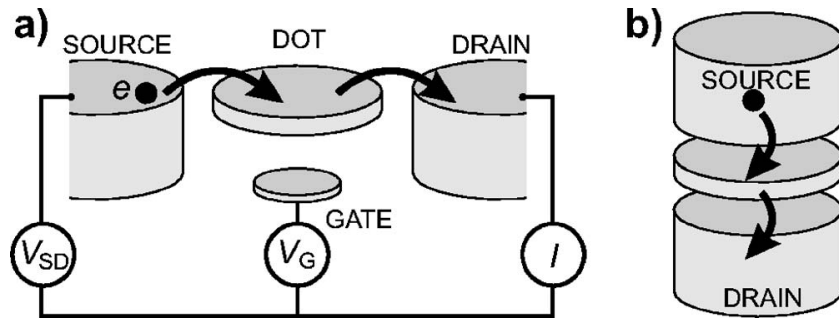
1.1.1 DRN w literaturze

Obliczenia i analizy przeprowadzone przez grupę, do której należałam nie były jedynymi jakie, zostały opublikowane w literaturze, podobną tematykę poruszyli między innymi M. Ivanov i P. Schmelter [1]. Kilka grup badawczych niezależnie od siebie otrzymywało struktury w postaci kropki otoczonej pierścieniem [2–5] stosując metody wymienione na początku rozdziału. M.G. Barseghyan dokładnie zbadał wpływ pola elektrostatycznego oraz obecności donorów na kształt funkcji falowych oraz energii własnych [6]. Grupa z Uniwersytetu Patras w Grecji opublikowała wyniki dotyczące liniowych i nieliniowych podatności optycznych (optical susceptibilities) [7]. Kolejną pracą dotyczącą manipulacji rozkładem ładunku i spinu jest publikacja dotycząca DRN opartego o ZnO [8]. Obliczenia dotyczące transportu ładunku przez DRN zbudowany na bazie grafenu opublikowali M.Seel i R.Pandey [9].

1.2 Kropki i pierścienie kwantowe - wstęp

Krzem stanowi podstawę dzisiejszej elektroniki i w oparciu o niego funkcjonują tranzystory zawarte między innymi w procesorach. Ich liczba na powierzchnię rośnie w tempie wykładniczym (co roku liczba tranzystorów na jednostkę powierzchni się podwaja [10]), niestety nie zawsze maksymalna ich liczba jest opłacalna ekonomicznie, co więcej krzywa opisująca prawo Moore ulegnie wysyceniu z uwagi na granice wynikające z rozmiarów atomów [11]. Wspomniany trend miniaturyzacyjny wymusza zmianę podejścia w wytwarzaniu układów scalonych, a także ogólnego podejścia do tematu. Jednym ze sposobów na ominięcie problemów jakie napotykamy przy miniaturyzacji, czyli dysypacji ciepła oraz granicy związanej z rozmiarami atomu jest wykorzystanie zarówno spinu jak i ładunku elektronu - tzw spintronika [12–14] drugim stworzenie komputerów kwantowych pracujących na qubitach - bitach kwantowych, które muszą spełnić szereg wymagań znanych jako kryteria DiVincenzo [15]. Obie drogi prowadzą przez nanoukłady czyli struktury o średnicy nieprzekraczającej kilkuset nanometrów. Wśród nich wyróżniamy kropki i pierścienie kwantowe. Mogą one zawierać zarówno elektrony jak i dziury, a także zostać sprzężone z elektrodami, co umożliwi przepływ ładunku przez nie, i bramkami, co pozwoli na zmianę potencjału elektrostatycznego układu. Z uwagi na niewielki rozmiar układu energia elektronu jest skwantowana. Odpychanie kulombowskie prowadzi do dodatkowego kosztu energetycznego niezbędnego do dodania elektronu do układu, co uniemożliwia tunelowanie dodatkowych elektronów (blokada kulombowska) i pozwala na kontrolę liczby nośników znajdujących się w układzie [16, 17]. W efekcie układ posiada dyskretne widmo. Z uwagi na powyższe cechy kropki kwantowe nazywane są sztucznymi atomami [18] i mogą być stosowane do badania zachowania spinu i elektronów [19].

Kropki kwantowe zostały wynalezione na początku lat 80-tych XX wieku. To osiągnięcie przypisuje się rosyjskiemu fizykowi o nazwisku Alexei Ekimow [20, 21]. Kilka lat później Luis Brus przedstawił zależność pomiędzy przerwą energetyczną a rozmiarem struktury dla nanoukładów półprzewodnikowych [22–24]. Wyliczył funkcje falowe stosując przybliżenie cząstki umieszczonej w sferze. Pierwsze udane



RYSUNEK 1.1: Schemat poprzecznej (lewa strona) i podłużnej (prawa strona) kropki kwantowej podłączonej do układu elektrod [17]

syntezy kropek kwantowych miały miejsce kilka lat później. Grupa Christophera Murrraya otrzymała koloidalne struktury CdX (gdzie $X = S, Se, Te$) o kontrolowanej absorpcji i emisji fotonów [25].

W zależności od geometrii wyróżniamy poprzeczne i podłużne kropki kwantowe, których schematy znajdują się na rysunku 1.1. Układ ten jest zazwyczaj połączony z elektrodami (źródłem i drenem) oraz sprzężony z jedną lub więcej bramkami umożliwiającymi kontrolę potencjału dna kropki.

1.3 Model stałego oddziaływania

Aby w poprawny sposób opisać procesy zachodzące w kropce kwantowej, należy wziąć pod uwagę oddziaływania elektronów między sobą i z otoczeniem, w tym wpływ bramki oraz elektrod na nośniki. Jednym ze stosowanych przybliżeń jest model stałego oddziaływania, który opiera się na dwóch postulatach [17]:

- wszystkie oddziaływania pomiędzy elektronami w kropce i z otoczeniem są opisane przez jedną stałą: pojemność „ C ”. Pojemność ta jest sumą pojemności pomiędzy kropką a źródłem/drenem/bramką.
- widmo pojedynczej cząstki jest niezależne od wymienionych powyżej oddziaływań, a zatem od liczby elektronów

Przyjmując wielkość napięcia na elektrodach (*Source* i *Drain*) i bramce (*Gate*) odpowiednio V_S, V_D, V_G całkowitą energię układu o N elektronach można zapisać za pomocą wzoru:

$$U(N) = \frac{[-|e|(N - N_0) + C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G]^2}{2C} + \sum_{n=1}^N E_N(B), \quad (1.1)$$

zaś potencjał chemiczny dla przejścia pomiędzy stanem podstawowym z N i $N+1$ elektronami:

$$\mu(N) = U(N+1) - U(N) = \left(N - N_0 - \frac{1}{2}\right) E_C - \frac{E_C}{|E|} (C_S V_S + C_D V_D + C_G V_G) + E_N \quad (1.2)$$

Z wzoru (1.2) wynika, że potencjał elektrochemiczny zależy liniowo od napięcia na bramce, a odległość pomiędzy kolejnymi poziomami energetycznymi jest stała.

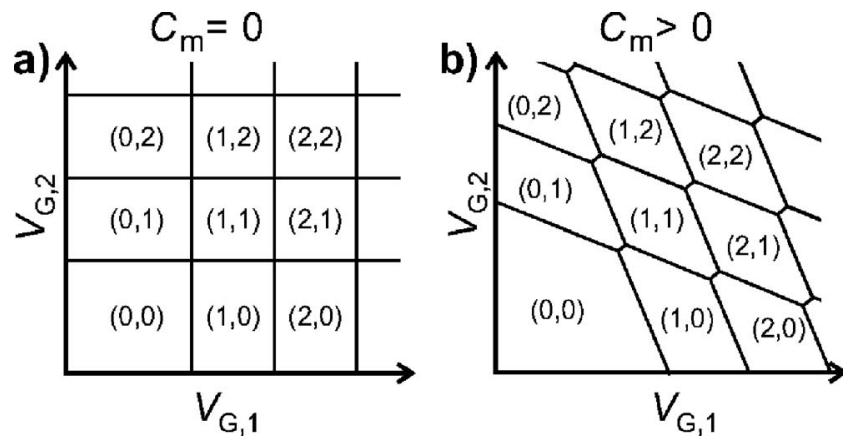
W ogólności dla przejścia między stanem „a” o $N - 1$ elektronach do N elektronowego stanu „b” wzór opisujący wartość potencjału chemicznego przyjmie postać:

$$\mu_{ab}(N) = U_b(N) - U_a(N - 1). \quad (1.3)$$

Za pomocą napięcia na bramce sprzężonej z kropką jesteśmy w stanie kontrolować które ze stanów układu powinny być uwzględnione w drabince stanów i dalszych obliczeniach (więcej w rozdziałach 2 i 4).

1.3.1 Układ dwóch kropek kwantowych

Rozwój nanotechnologii umożliwił stworzenie układów składających się z więcej niż jednej kropki kwantowej, w tym przypadku dwóch, których potencjał i pośrednio liczba znajdujących się w nich elektronów są kontrolowane niezależnie przez bramki V_{G1} i V_{G2} . W zależności od sprzężenia pomiędzy kropkami napięcie przyłożone do jednej może mieć wpływ na liczbę elektronów w drugiej, jak to zilustrowano na rysunku 1.2.



RYSUNEK 1.2: Diagram przedstawiający zależność liczby elektronów w poszczególnych kropkach w zależności od napięcia na bramkach. Po lewej stronie kropki niesprężone pojemnościowo, napięcie na bramce jednej kropki nie wpływa na ilość elektronów w drugiej. Po prawej stronie kropki sprężone pojemnościowo, prostokąty przyjmują kształt równoległoboków, zmiana napięcia na jednej kropce wpływa na ilość elektronów w obydwu. [17]

Dla kropek, w których sprzężenie pojemnościowe jest niezerowe, diagram stabilności przyjmuje postać heksagonalną (plastra miodu) z dwoma punktami (trójkątami dla większej różnicy potencjałów źródło-dren) potrójnymi, gdzie stan jest potrójnie zdegenerowany, ich odległość jest zależna od sprzężenia pojemnościowego pomiędzy kropkami C_m .

Układ dwóch kropek można połączyć z elektrodami w sposób szeregowy lub równoległy. Potencjał elektrochemiczny konfiguracji, w której kropka o indeksie 1 jest połączona z źródłem, a o indeksie 2 z drenem, przyjmuje następującą postać:

$$\begin{aligned} \mu(N_1, N_2) = U(N_1, N_2) - U(N_1 - 1, N_2) = (N_1 - \frac{1}{2})E_{C1} + N_2C_{Cm} \\ - \frac{E_{C1}}{|e|}(C_S V_S + C_{11}V_{G,1} + C_{12}V_{G,2}) + \frac{E_{Cm}}{|e|}(C_D V_D + C_{22}V_{G,2} + C_{21}V_{G,1}). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Elektrony nie są w stanie dostać się bezpośrednio do drugiej kropki, muszą wpierw znaleźć się w pierwszej, a potem dopiero mogą tunelować do drugiej.

1.4 Otrzymywanie nanoukładów

Wytworzenie nanoukładów o odpowiedniej symetrii stanowi wyzwanie. Istnieją kryteria, jakim muszą sprostać struktury, by zostać dopuszczone jako próbki do badań bądź zastosowane w gałęziach medycyny czy gospodarki. Ich rozmiar musi być odpowiednio mały, by można go było opisywać prawami mechaniki kwantowej (silna dyskretyzacja widma). Układ musi być stabilny zarówno pod względem chemicznym jak i strukturalnym. Co więcej technologia musi zapewnić powtarzalność otrzymywanych struktur oraz być optymalna pod względem kosztów.

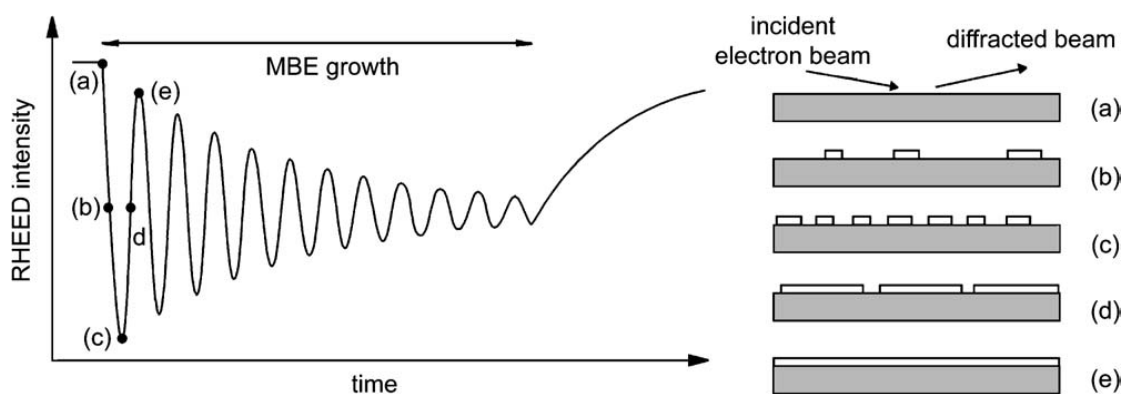
Współczesne technologie są zróżnicowane umożliwiając otrzymywanie kropek kwantowych o średnicach od kilku do kilkuset nanometrów. Kropki mogą być wytwarzane zarówno w materiałach półprzewodnikowych, jak i grafenie [26] czy metalach [5].

1.4.1 Epitaksjalny wzrost

Epitaksja z wiązek molekularnych (MBE - *Molecular beam epitaxy*)[27, 28] jest jedną z podstawowych metod otrzymywania kropek kwantowych. Technika ta polega na uporządkowanym wzroście kolejnych monowarstw przy zachowaniu układu krystalicznego podłoża. Osadzanie cienkich warstw pierwiastków z grup III-V w wybranych punktach odbywa się dzięki oddziaływaniu wiązki atomowej z molekułami na powierzchni sieci krystalicznej w ultra wysokiej próżni. Proces

został zbadany dzięki symulacjom Monte Carlo opartych na pracach eksperymentalnych. Kationy (III grupa) ulegają chemisorpcji na rozgrzanym podłożu, migracji i włączeniu w odpowiednich węzłach. Dimery i tetramery anionowe z kolei wpierw ulegają migracji na powierzchni w słabo związanych fizysorbantach, by ulec dysocjacji i włączeniu do struktury przez związanie z kationami na powierzchni. Migracja adatomów jest procesem aktywowanym termicznie opisanym przez prawo Arrheniusa. Energia aktywacji kationów jest wyższa od anionów.

W celu obserwacji procesu wzrostu, a zatem i oceny gładkości powierzchni wykorzystuje się RHEED (*Reflection high-energy electron diffraction* - dyfrakcja wysokoenergetycznych elektronów). Wygenerowana przez działło elektronowe wiązka elektronów o energii z zakresu 10-50 keV uderza w powierzchnię podłoża. Ze względu na jego geometrię nie koliduje ono z wiązką molekularną, a odbite elektrony tworzą obraz dyfrakcyjny. Oscylacje widoczne na widmie RHEED (rysunek 1.3) spowodowane są pojawianiem się wysp, których brzegi stanowią centra rozproszeń, co w efekcie powoduje spadek intensywności widma. W momencie całkowitego wypełnienia powierzchni, wartość natężenia powraca do wartości nieco niższej od wartości początkowej. Okres oscylacji jest równy czasowi napyłania jednej warstwy.



RYSUNEK 1.3: Widmo RHEED jako funkcja czasu [29]. Miniatury po prawej stronie (a-e) obrazują kolejne etapy wzrostu struktury

Proces powstawania warstwy dwuwymiarowej po warstwie nazywany jest *step flow*. Jest on możliwy przez wzgląd na to, iż włączanie pierwiastków III grupy jest bardziej korzystne na brzegach istniejących już wysp niż na ich powierzchni. Gdy długość migracji powierzchniowej λ wyżej wymienionych pierwiastków jest

krótsza od odległości między wyspami D , część kationów osadzi się na istniejących już wyspach, podczas gdy pozostałe utworzą nowe wyspy (możliwe jest tworzenie ich na już istniejących). Tworzenie kolejnej warstwy rozpocznie się, gdy λ będzie większa od D , co ma miejsce gdy poprzeczny rozrost wysp spowoduje zetknięcie się ich brzegów. Gęstość uzyskanych w ten sposób warstw jest stała.

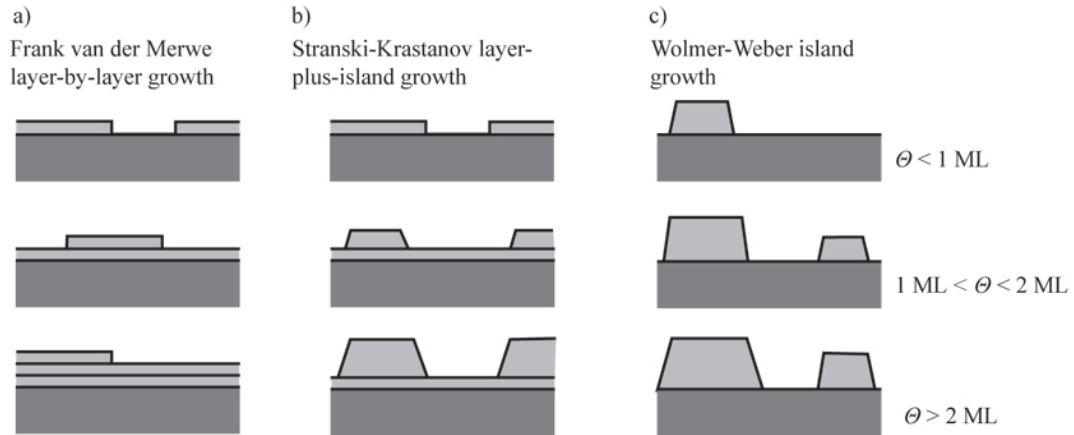
Wzrost niedopasowanych struktur heteroepitaksjalnych jest efektem trójwymiarowego MBE. W początkowej fazie procesu wzrost następuje warstwa po warstwie wedle dwuwymiarowego MBE z stałą sieci podłoża. W momencie gdy ilość osadzonego związku przekroczy krytyczną wartość pokrycia następuje formowanie trójwymiarowych wysp o średnicy rzędu kilkudziesięciu nanometrów i wysokości kilku nanometrów. Powodem zmiany procesu wzrostu jest relaksacja energii sprężystości która wzrasta w miarę zwiększania grubości niedopasowanych epiwarstw.

Niewątpliwą zaletą tej metody jest możliwość precyzyjnego domieszkowania układu dowolnym pierwiastkiem, a także powtarzalność otrzymywanych struktur.

1.4.2 Samozorganizowany wzrost struktur

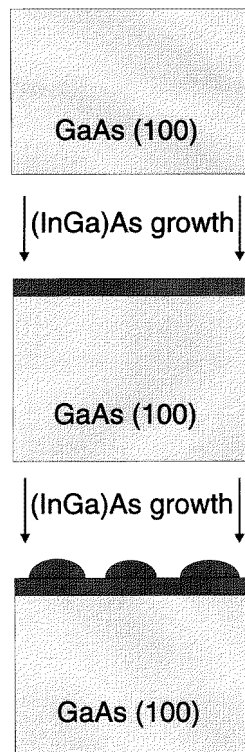
Techniką bazującą na epitaksjalnym wzroście kryształu jest samozorganizowany wzrost (*self assembled growth* [30–34]) wewnątrz której tryby wzrostu sklasyfikowano (i zilustrowano na rysunku 1.4) w następujący sposób:

- a) wzrost typu Frank van der Merwe: warstwa po warstwie na sieciowo dopasowanych układach [35],
- b) wzrost typu Stranski - Krastanov: wyspy po warstwie na sieciowo niedopasowanych układach [36],
- c) wzrost typu Volmer-Weber: wzrost wysp charakteryzuje się natychmiastowym zarodkowaniem wysp współistniejących z czystym podłożem na poziomie niższych warstw [37].



RYSUNEK 1.4: Schemat samorganizowanego wzrostu struktur. Kolejne podpunkty (a-c) odpowiadają wymienionym w rozdziale typom. Θ oznacza liczbę monowarstw [30]

We wczesnym stadium wzrostu typu Stranski - Krastanov formujące się wyspy są pozbawione defektów, co pozwala na uzyskiwanie układów wysokiej jakości. Proces został przedstawiony na rysunku 1.5.



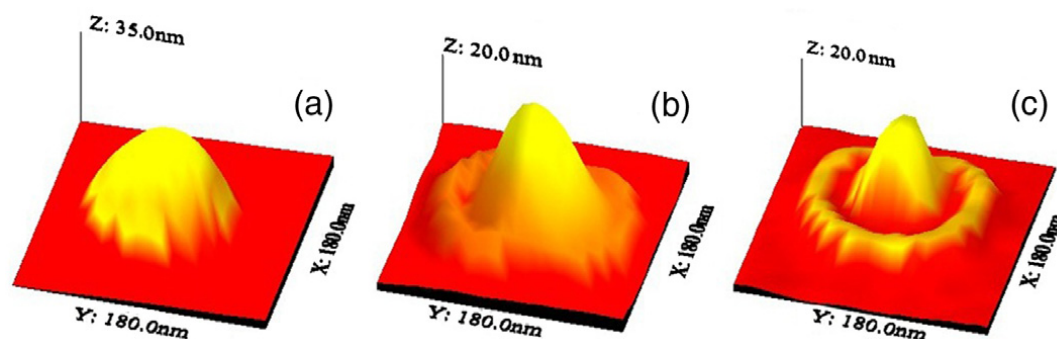
RYSUNEK 1.5: Schemat samorganizowanego wzrostu [32]

Powolne zmiany wartości naprężeń na tym etapie są spowodowane sprężystymi odkształceniami na brzegach wysp. Zmniejszenie energii sprężystości przeważa

dodatkowy koszt energetyczny wynikający z formowania wysp zamiast warstw. Poniżej krytycznego rozmiaru korzystniejsze jest również formowanie koherentnych wysp zamiast rozproszonych. Kontrola gęstości wysp jest możliwa przez manipulację grubością warstwy arsenu (indu, galu), orientacji podłoża lub zmianie temperatury w jakiej zachodzi proces. Niższa temperatura podłoża sprzyja zagęszczeniu wysp, podobnie zwiększenie grubości warstwy InAs, któremu towarzyszy nieznaczne zwiększenie średnicy wysp. Kropki o orientacji pionowej otrzymywane są w wyniku osadzania kolejnych warstw wysp oddzielonych cienkimi warstwami.

1.4.3 Epitaksja kropłowa

Kolejną metodą bazującą na epitaksjalnym wzroście jest epitaksja kropłowa (*Droplet Epitaxy*), która w przeciwieństwie do MBE pozwala na wytwarzanie nanoukładów o pożądanej geometrii, w tym układu złożonego z kropki otoczonej pierścieniem (Dot Ring Nanostructure - w skrócie DRN)[3]. Proces można przeprowadzić kilku etapowo (*Multiple Droplet Epitaxy*) [4]. Wzrost struktury zachodzi dzięki pulсовemu naświetlaniu pierwiastków III grupy pierwiastkami V. Proces zachodzi w ściśle określonej temperaturze, zapewniając każdemu pulsowi prawdopodobieństwo selektywnego skryształizowania zmieniając tryb wzrostu struktury i tym samym zapewniając pożądaną geometrię.



RYSUNEK 1.6: AFM: Kolejne etapy otrzymywania DRN dzięki DE [2, 3]

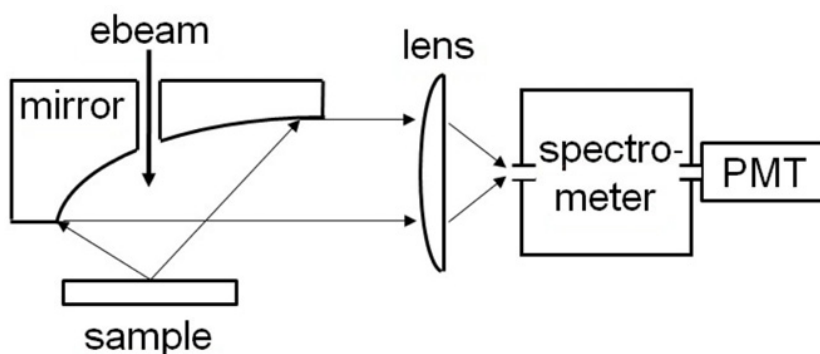
Otrzymywanie struktury DRN zostało przedstawione na rysunku 1.6. Jako podłoże zastosowano wafle GaAs(001). Po zdeponowaniu kropli galu uformowana została półsfera (a). Po pierwszym pulsie arsenu zostaje uformowany pierścień

(GaAs), co spowodowane jest powierzchniową dyfuzją atomów galu z kropli pod wpływem naświetlania arsenem. Przebieg procesu jest zdeterminowany kinetyką rekonstrukcji. Część galu zostaje związana w centralnej części struktury, która pozostaje w początkowej pozycji (b). Kolejny puls arsenowy, o niższej temperaturze, formuje wewnętrzną kropkę (c).

Technika pozwala na dużą swobodę w kreowaniu nanoukładów. Kontrola czasu naświetlania pozwala na kontrolę objętości skryształizowanego materiału. Zastosowanie dwóch pulsów umożliwia uzyskanie dwóch pierścieni otaczających kropkę.

1.4.4 Litografia wiązki elektronowej

Litografia wiązki elektronowej (EBL - *Electron Beam Litography*) jest cenioną otrzymywania nanoukładów. Do jej zalet należą wysoka rozdzielczość rzędu nanometrów oraz różnorodność materiałów dla jakich można ją stosować [38]. Podobnie jak w przypadku większości odmian litografii, podłoże jest pokryte cienką warstwą rezystu (analogia do fotorezystu dla fotolitografii), który ulega zmianom pod wpływem wiązki elektronowej. Na dalszym etapie próbka jest poddawana trawieniu, gdzie w zależności od tego czy mamy pozytywną, czy negatywną litografię wytrawiane są odpowiednio zmienione bądź niezmienione obszary. Na całość napyłana jest warstwa metalu, po czym pozostała część rezystu jest usuwana chemicznie.



RYSUNEK 1.7: Schemat układu EBL z CL [38]

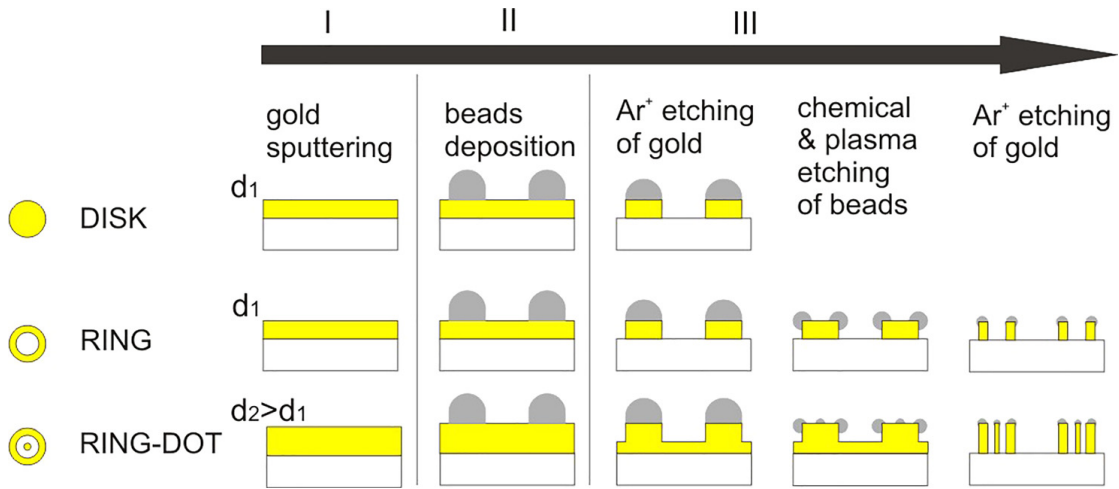
Powyższa technika została przedstawiona schematycznie na rysunku 1.7. Osiąga zadowalające efekty w połączeniu z katodoluminescencją (CL), która nie wpływa bezpośrednio na proces litografii. Umożliwia to przeprowadzenie pojedynczych

kroków EBL bez potrzeby stosowania znaczników, co znacznie przyspiesza proces i pozwala na obrazowanie struktur.

1.4.5 Litografia koloidalna

Litografia koloidalna, znana również jako nanosferyczna litografia łączy w sobie elementy tradycyjnej litografii z maskami rozmiarów nanometrów, dzięki czemu możemy otrzymać struktury o pożądanym kształcie przy mniejszym nakładzie kosztów [5, 39, 40]. Proces wytwarzania struktur (dysk, pierścień lub hybryda wymienionych) odbywa się trójetapowo:

1. zdeponowanie warstwy metalu (w tym przypadku złota), której grubość determinuje wysokość struktury. Przed osadzeniem warstwy metalu szklane podłoże zostało poddane szyszczeniu chemicznemu (zastosowane sekwencyjnie rozpuszczalniki zarówno polarne jak i niepolarne, a następnie osuszone azotem). Następnie napyłono zapewniającą przyczepność warstwę tytanu, a na nią złota.
2. homogeniczna aplikacja masek polistyrenowych w postaci ziaren. Na homogeniczność rozkładu ziaren polistyrenowych wpływa adhezja podłoża. Aktywowanie metalowego podłoża poprzez adhezję naładowanej elektrycznie warstwy polielektrolitu zwiększa mobilność ziaren.
3. selektywne wytrawianie. Proces determinujący końcową formę nanostruktury, polegający na usunięciu fragmentów niepokrytego ziarnami metalowego podłoża, co przedstawiono na rysunku 1.8. Pojedyncze wystawienie na długi czas trawienia owocuje otrzymaniem dysku. Dodatkowe trawienie poprzedzone umieszczeniem próbki w chloroformie pozwala na otrzymanie pierścienia. Ziarna polistyrenowe pod wpływem powyższych czynników ulegają podziałowi i odseparowując część wewnętrzną od zewnętrznej. Po oczyszczeniu plazmą tlenową środkowy fragment zostaje usunięty, tak że zostaje tylko pierścień.



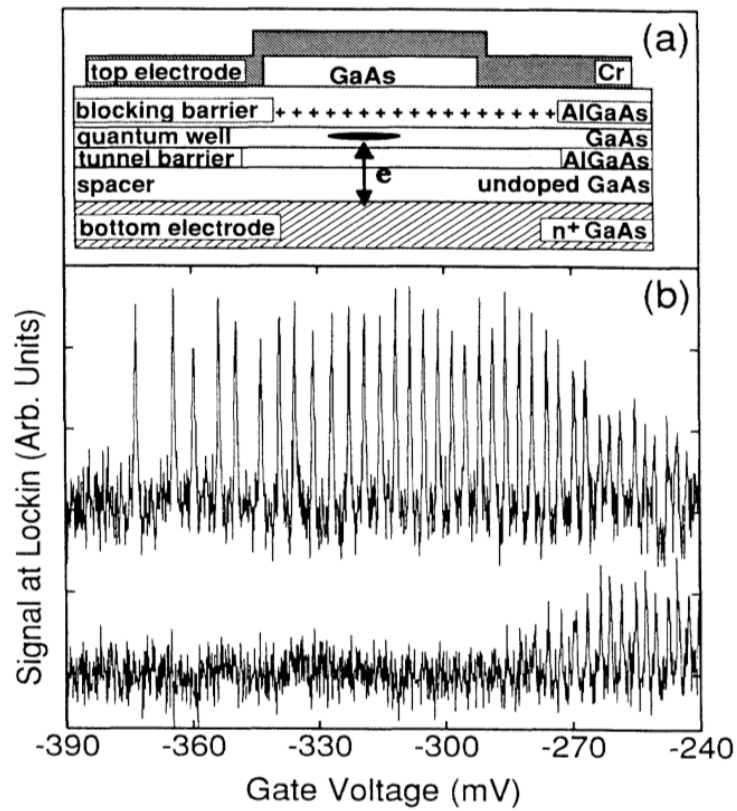
RYSUNEK 1.8: Otrzymywanie struktur za pomocą litografii koloidalnej [5]

W celu otrzymania kropki kwantowej otoczonej jednym lub dwoma pierścieniami należy postępować jak w przypadku otrzymywania pierścienia z tą różnicą, że należy zwiększyć grubość złota napyloną na próbkę, tak aby po wytrawieniu w kroku pierwszym nadal pozostała warstwa złota w środkowej części nanostruktury [5].

1.4.6 Układ elektrod

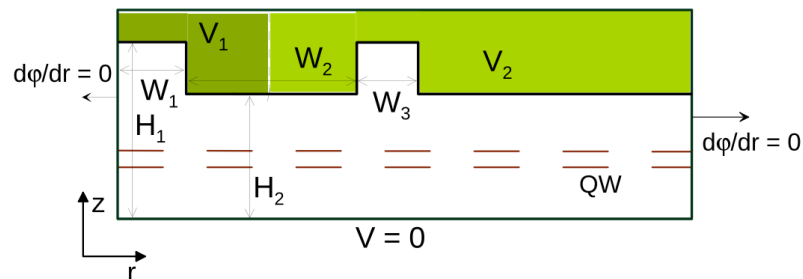
Wiele półprzewodnikowych nanoukładów składa się z odpowiednio domieszkowanych warstw. Na skutek przyłączenia napięcia w miejscu styku warstw powstaje pomiędzy nimi cienka warstwa, w której elektrony mogą się swobodnie poruszać. Jest ona z dobrym przybliżeniem dwuwymiarowym gazem elektronowym (2DEG - *two-dimensional electron gas*). Przyłączenie elektrod (jednej u góry, drugiej z dołu jak na rysunku 1.9) do układu pozwala wpływać na efektywny potencjał studni kwantowej [41, 42]. Pojemność układu zmienia się w zależności od napięcia na bramce.

Układy półprzewodnikowe o symetrii cylindrycznej można otrzymać stosując metalowe elektrody rozdzielone izolatorem w układzie *split gate*. Przykładowo, w celu uzyskania struktury o geometrii będącej tematem pracy od górnej strony umieszczamy dwie elektrody, jedną po środku i drugą o kształcie pierścienia otaczającą ją jak na rysunku 1.10. Zakładamy, że potencjał na dolnym brzegu układu



RYSUNEK 1.9: Schemat półprzewodnikowej kropki kwantowej z załączonymi elektrodami [43, 44]

wynosi 0 meV, zaś pochodna potencjału na końcach układu się zeruje. Potencjały górnych elektrod wynoszą odpowiednio V_1 (ciemny zielony) i V_2 (jasny zielony) i są oddzielone od siebie izolatorem a odległość obszarów działania od podłoża to H_1 i H_2 .

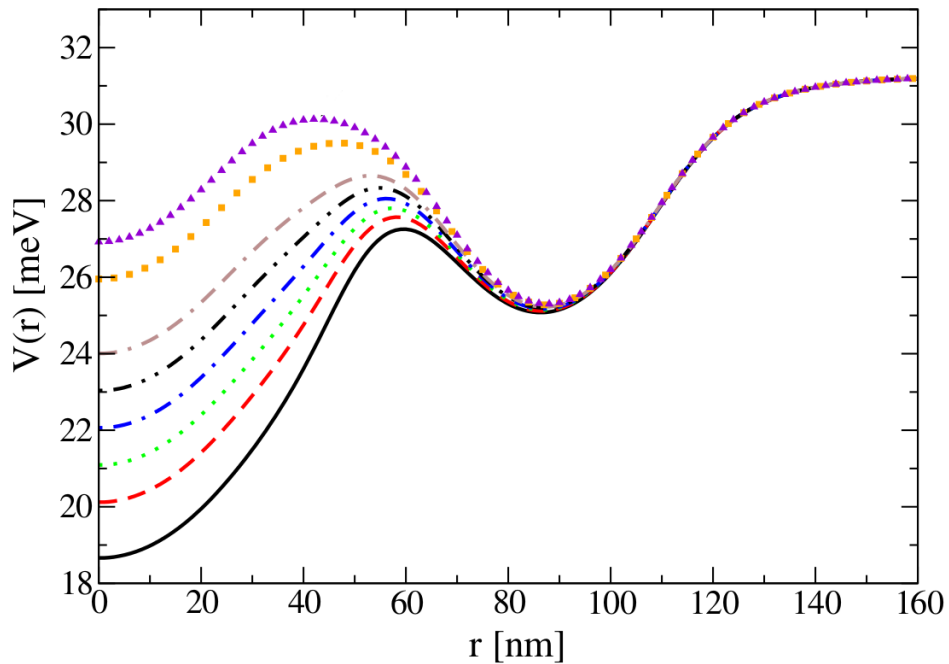


RYSUNEK 1.10: Układ elektrod do wytworzenia potencjału DRN [45]

Efektywny potencjał uzyskany dzięki takiemu zabiegowi (przerywana linia na rysunku 1.10) opisuje równanie Laplacea:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) \varphi(z, r) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z, r) = 0, \quad (1.5)$$

w którym rozkład potencjału zapisujemy w sposób dyskretny. Do rozwiązania stosujemy metodę relaksacji punktowej znanej również jako metoda Seidla. Modyfikując wartości napięcia elektrod oraz położenia, jesteśmy w stanie uzyskać interesujący nas potencjał. W efekcie dla podanego układu możemy określić potencjał jako funkcję napięcia na centralnej bramce jak na rysunku 1.11.

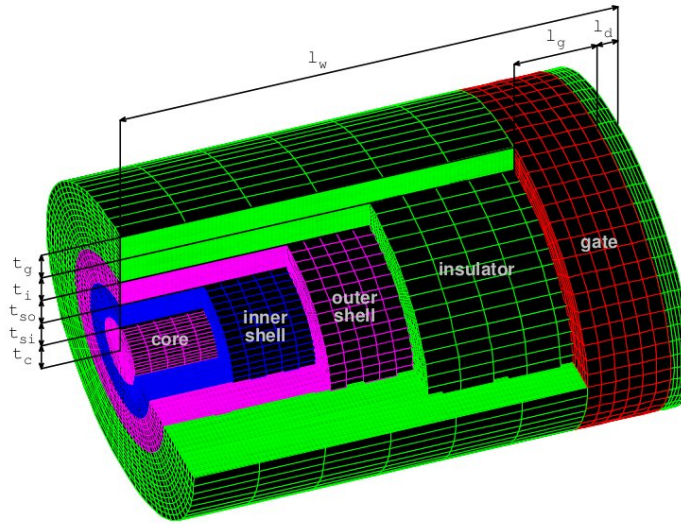


RYSUNEK 1.11: Rozwiązanie równania Laplacea dla układu dwóch elektrod [46]

1.4.7 Nanodruty wielowarstwowe - CMS

Współczesne technologie pozwalają na wytwarzanie półprzewodnikowych nanodrutów o strukturze wielowarstwowej CMS (*core-multishell nanowire* [47–52]). Uzyskiwane w ten sposób nanoukłady posiadają średnice zewnętrzne nie mniejsze od 30 nm. Otrzymane w ten sposób struktury mogą pełnić rolę DRN. Przykładowy układ przedstawiono na rysunku 1.12. Rdzeń pełni rolę kropki kwantowej, zewnętrzna warstwa pierścienia, zaś warstwa wewnętrzna stanowi barierę oddzielającą obydwa układy od siebie.

Warstwy te narastają wokół monokrystalicznego rdzenia służącego za szablon. Jedną z technik jest VLS (*Vapor-Liquid-Solid*). Jest to metoda wzrostu kryształu wykorzystująca metaliczny katalizator, który tworzy fazę ciekłego stopu. Na skutek szybkiej adsorpcji para ulega przesyleniu i krople stopu zostają zdeponowane na substracie. Osadzanie pierwiastka z fazy gazowej następuje tak długo, jak pierwiastek dostarczany jest do fazy gazowej.



RYSUNEK 1.12: Schemat CMS [47]

Na tak uzyskanym rdzeniu osadzane są kolejne warstwy, w zależności od pierwiastka dobierana jest odpowiednia technika:

- IV grupa - niekatalityczny wzrost na ścianach pierwszego nanodrutu,
- III - V metaloorganiczne osadzanie chemiczne z fazy gazowej (*metalorganic chemical vapor deposition*).

Innymi metodami umożliwiającymi otrzymanie podobnych struktur jest pięcioetapowy proces wytrawiania [52].

1.4.8 Porównanie metod otrzymywania struktur

Struktura będąca tematem rozprawy jest skomplikowana z punktu widzenia otrzymywania. Nie wszystkie metody umożliwiają jej wytworzenie, a tym bardziej

kontrolę kształtu. Z uwagi na to preferowane są technologie pozwalające na precyzyjną kontrolę kształtu otrzymywanej struktury.

Litografia koloidalna i epitaksja kropkowa umożliwiają otrzymanie kropek kwantowych otoczonych więcej niż jednym pierścieniem. Struktury są wykonane w całości z jednego materiału, promienie są duże (około 100 nm), wysokości niewielkie (nawet rzędu kilku atomów). Zastosowanie układu elektrod pozwala na otrzymanie potencjału zbliżonego do oczekiwanego, czyli kropki otoczonej pierścieniem. Niestety wraz ze zmianą potencjału kropki zmienia się również wysokość i położenie bariery wewnętrznej, co nie zawsze jest zjawiskiem pożądanym, ponieważ utrudnia manipulację funkcjami falowymi (więcej w rozdziale 2). Układy o mniejszym promieniu, złożone z jednego lub dwóch materiałów, otrzymujemy przez wykorzystanie drutów wielowarstwowych, jednak ich wysokość jest większa niż w przypadku pozostałych technik. Im mniejszy układ, tym trudniejsze jest połączenie go z elektrodami.

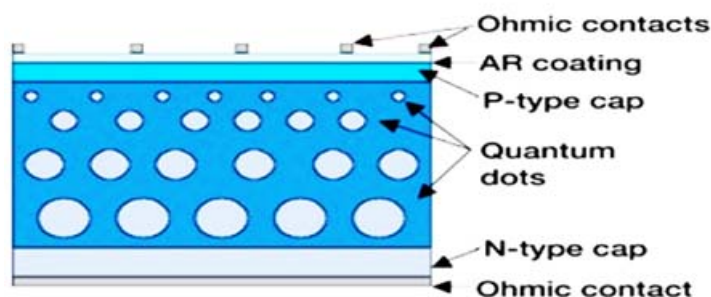
1.5 Zastosowanie kropek kwantowych

Kropki kwantowe znajdują zastosowanie w wielu gałęziach nauki i gospodarki [53–55]. Ich własności różnią się w zależności od rozmiaru, kształtu i materiału z jakiego zostały wykonane. Z uwagi na możliwość kontrolowania liczby znajdujących się w nich elektronów istnieje możliwość symulowania atomów za ich pomocą. Jednoelektronowe układy złożone z kropek kwantowych mogą pełnić role tranzystorów, prostowników, bramek logicznych, zarówno kwantowych jak i klasycznych. Skomplikowane układy kropek są potencjalnymi kandydatami na realizację qubitów. W przemyśle kropki kwantowe znajdują zastosowanie między innymi w opisanych poniżej gałęziach.

1.5.1 Elektronika i optyka

Własności absorpcji i emisji fotonów przez kropki kwantowe są związane z odległością stanów energetycznych w układzie, te zaś ściśle zależą od rozmiaru struktury. Układ jest w stanie zaabsorbować i następnie na skutek relaksacji wyemitować światło o konkretnej długości fali. Kropki kwantowe o niewielkich rozmiarach posiadają bardziej odległe stany i emitują światło o wyższej częstotliwości (niebieskie) zaś większe o niższej (czerwone).

Do potencjalnych zastosowań należy między innymi trzecia generacja paneli słonecznych (*quantum dot solar cell*) [53, 56]. Budowa panelu została zilustrowana na rysunku 1.13. Kropki kwantowe wykonane z CdTe, CIGS lub krzemu są w stanie absorbować energię przez całą dobę. Kropki wykonane z czarnego krzemu absorbują światło widzialne, te wykonane z innych materiałów zaś podczerwień, bądź ultrafiolet.

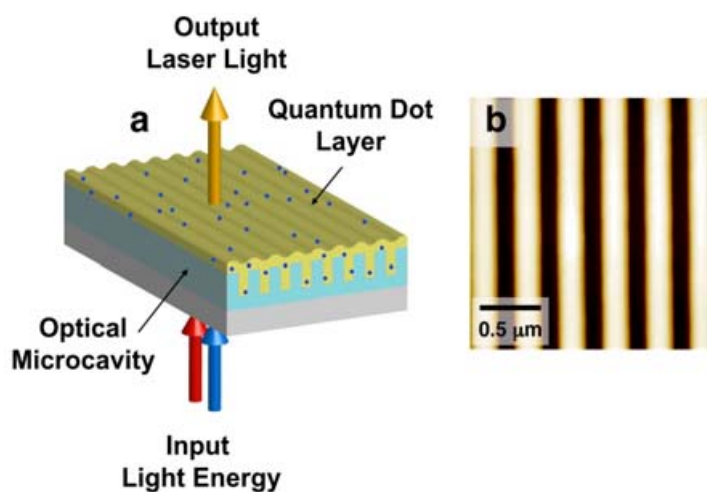


RYСУNEK 1.13: Schemat kwantowego panelu słonecznego [53]

Innym miejscem w którym kropki kwantowe znajdują zastosowanie są lasery (rysunek 1.14). Wydajność laserów skonstruowanych w ten sposób jest zbliżona do laserów gazowych.

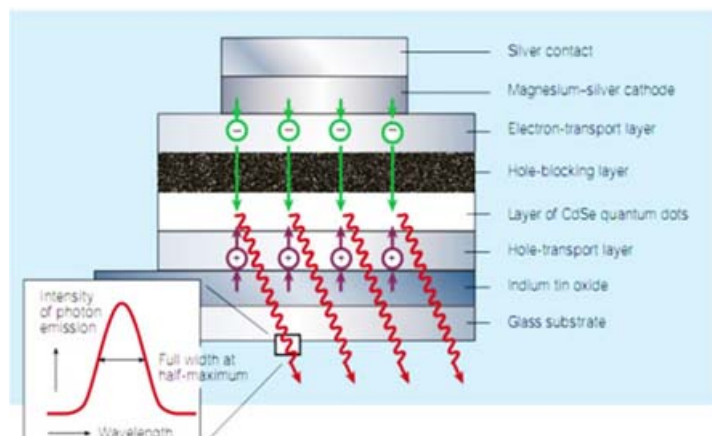
Kropki kwantowe w tej sytuacji działają jak sztuczne atomy i pełnią rolę ośrodka czynnego. Odpowiednio dobierając rozmiary kropek kwantowych można uzyskać lasery o szerokim spektrum.

Możliwość dokładnego wyznaczenia długości emitowanej fali znajduje zastosowanie w technologii ekranów LED (schemat przedstawiono na rysunku 1.15). Wyświetlacze zbudowane w oparciu o kropki kwantowe (QDLEDs) wykazują mniejszą



RYSUNEK 1.14: Schemat lasera opartego na kropkach kwantowych[53]

energochłonność niż OLEDy (*organic LEDs*) przy jednocześniej większej czystości koloru. Technologia wytwarzania ultra cienkich warstw sprzyja zmniejszeniu kosztów produkcji i umożliwia otrzymywanie cienkich ekranów o różnych kształtach, zarówno płaskich jak i lekko wklęsłych. Budowa ekranu opartego na kropkach kwantowych jest podobna do tych opartych na innym materiałach. Warstwą odpowiedzialną za emisję koloru jest selenek kadmu (CdSe), znajduje się on pomiędzy organicznymi warstwami odpowiedzialnymi za transport elektronów i dziur.

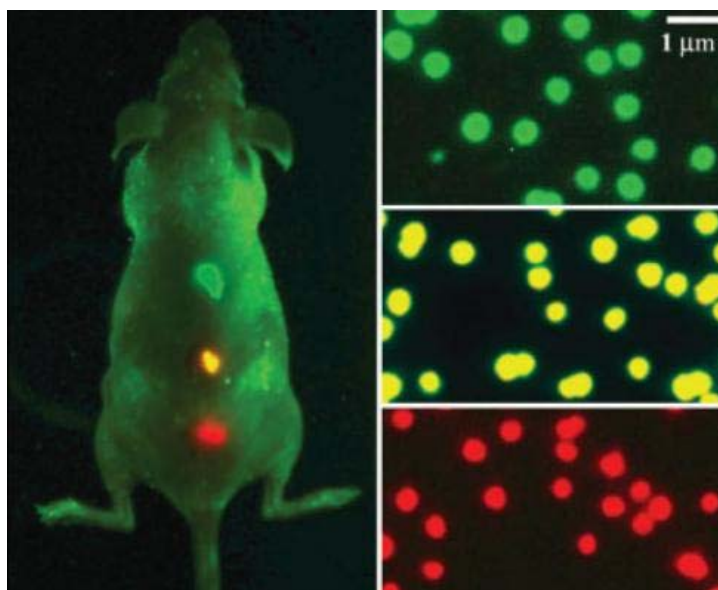


RYSUNEK 1.15: Schemat ekranu QLED [53]

Pierwsze komercyjne ekrany tego typu zostały zaprezentowane przez firmę Samsung w 2014 roku. W 2017 zaprezentowano monitory o zakrzywionym (wklęsłym) ekranie bazujące na tej samej technologii.

1.5.2 Biologia i medycyna

Dzięki kropkom kwantowym jest możliwe długotrwałe monitorowanie komórek i struktur komórkowych. Niewielkie rozmiary i zdolności fluorescencyjne sprzyjają dokładnemu umieszczeniu znacznika (rysunek 1.16). Zastosowanie sond fluorescencyjnych na znakowanych komórkach może znaleźć zastosowanie w monitorowaniu leków, jak np. dostarczanie dokсорubicyny do komórek rakowych gruczołu krokowego.



RYSUNEK 1.16: Obrazowanie komórek in vivo za pomocą kropek kwantowych [53]

Umieszczenie kropki kwantowej stwarza pewne trudności. Pasywne przechodzenie przez błonę komórkową do cytoplazmy jest mało wydajne, jednakże przyłączenie odpowiednich ligandów powoduje wiązanie się ich z receptorami na powierzchni błony komórkowej. Kropki kwantowe, które znalazły się w komórce w ten sposób są unieruchamiane przez zamknięcie w endosomach. Inną metodą umieszczania kropek kwantowych w komórkach jest mikroiniekcja bądź elektroporacja.

Możliwość dokładnego wskazania segmentów i struktur zarodka wywodzących się z konkretnych komórek, a także ich migracji umożliwia monitorowanie przeżyców komórek nowotworowych.

Rozdział 2

Dot Ring Nanostructure

Qubity, czyli bity kwantowe mogą zostać zrealizowane między innymi w oparciu o spin elektronu. Nanoukłady takie jak kropki czy pierścienie kwantowe są obiecującymi kandydatami na realizację tych układów. Aby układ mógł pełnić tę rolę musi pozostawać w konkretnym stanie przez odpowiednio długi okres czasu, tak aby można było dokonać wymaganych operacji. Dekoherencja jest nieuniknionym elementem otaczającego nas świata, jednak bez oddziaływania z otoczeniem nie byłoby możliwości odczytu ani modyfikacji stanu układu. W celu jej opisania używa się dwóch parametrów: T_1 (czas relaksacji omówiony w rozdziale 3) oraz T_2 (czas dekoherencji) wahający się od milisekund do sekund [57]). Przyjmuje się, że czas w jakim układ pozostaje koherentny powinien być znacznie dłuższy od czasu wykonania operacji na bramkach logicznych, który jest rzędu milisekund [15, 57]. Dokładny opis mechanizmów odpowiedzialnych za relaksację znajduje się w rozdziale 3.

Im mniejszy układ tym dłużej zachowuje informację o stanie początkowym, zatem jedną z dróg do uzyskania zadowalających czasów jest miniaturyzacja, co jak zostało wspomniane wcześniej ma swoje granice wynikające choćby z rozmiarów atomów. Optymalny rozmiar struktury jest trudny do uchwycenia z uwagi na trudności związane z produkcją, połączeniem układu z elektrodami, koszta produkcji, dysypację ciepła itp. Można wykorzystać materiały o niskim efektywnym sprzężeniu spin orbita, jednak konsekwencje tego posunięcia są nietrywialne. Pociąga ona

za sobą zmianę pozostałych elementów związanych ze strukturą jak różnica energetyczna wynikająca rozczepienia zeemanowskiego czy odległości poszczególnych stanów.

Motywacją badań było znalezienie układu o niewielkich rozmiarach, który pozwalałby za pomocą manipulacji jedną bramką i napięciem źródło-dren zmieniać swoje parametry, między innymi przewodnictwo i czas relaksacji. W ramach poszukiwań realizacji qubitu porównano szybkości relaksacji dla kropek i pierścieni o różnych rozmiarach i geometriach zamodelowanych za pomocą poniższego równania [58].

$$V(r) = \frac{1}{2}m^*\omega_0^2 \left[(1-k)r^2 + \frac{k}{1-k}(r-r_0)^2 \right], \quad (2.1)$$

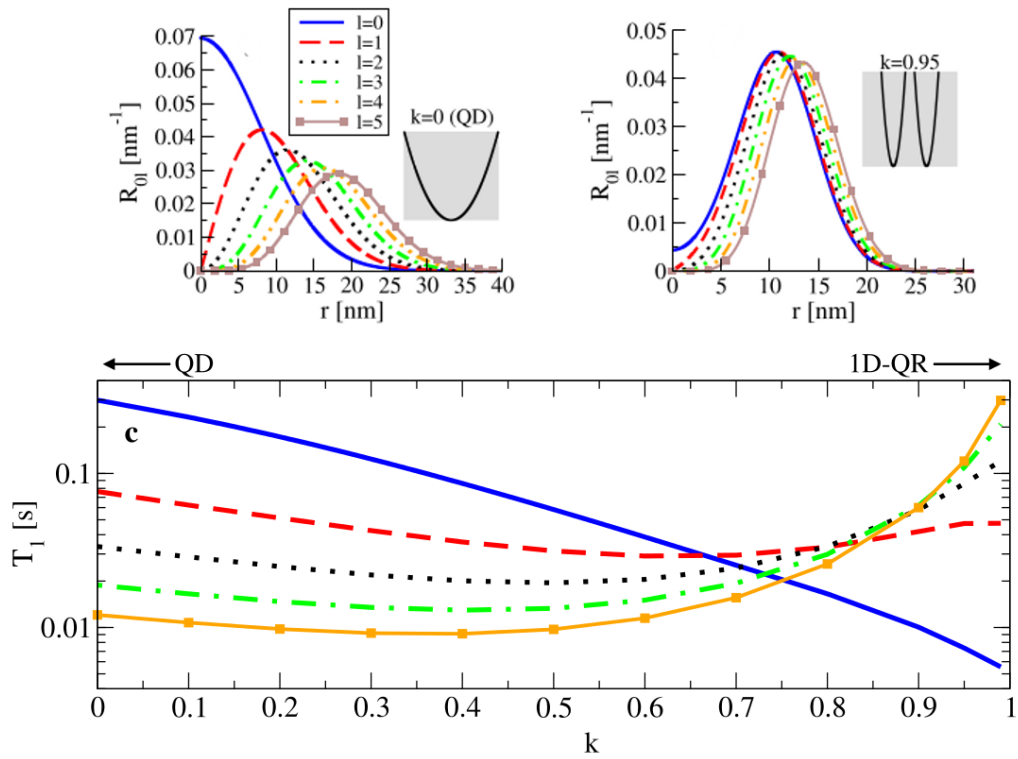
gdzie m^* jest masą efektywną elektronu, ω_0 częstotliwością własną, r_0 promieniem pierścienia, a k parametrem definiującym kształt struktury. Dla $k = 0$ układ jest klasyczną kropką kwantową, dla $k \rightarrow 1$ układ jest pierścieniem.

k	0	0.2	0.4	0.6	0.8	0.95	0.99
$T_1[s]$	0.3	0.17	0.086	0.039	0.017	0.007	0.006

Poszczególne czasy relaksacji w zależności od kształtu struktury (parametru k) zostały wymienione w powyższej tabeli i na rysunku 2.1. Dla qubitów jednoelektronowych znaczenie ma relaksacja ze stanu 00 do stanu 01 (niebieski kolor na wykresie 2.1). Warto zwrócić uwagę, że osiąga ona większą wartość dla układów o geometrii kropki, gdzie funkcje falowe są bardziej zróżnicowane niż w pierścieniu.

Na relaksację i przewodnictwo wpływa także kształt i wzajemne położenie funkcji falowych dla poszczególnych stanów, pożądana jest zatem struktura w której funkcje falowe ulegają zmianom w kontrolowanym i znacznym stopniu. A konkretniej parametr odpowiadający za 'pokrywanie się' funkcji, tzw. *overlap factor* (więcej w rozdziale 3) był jak najmniejszy.

Niestety klasyczne kropki i pierścienie kwantowe nie należą do układów, które można modyfikować w łatwy sposób. Raz otrzymana struktura nie ulega zmianom, można jedynie kontrolować liczbę elektronów zawartych w niej oraz to, które stany biorą udział w transporcie. Jedyne wpływy na funkcje falowe jakie mamy wynika

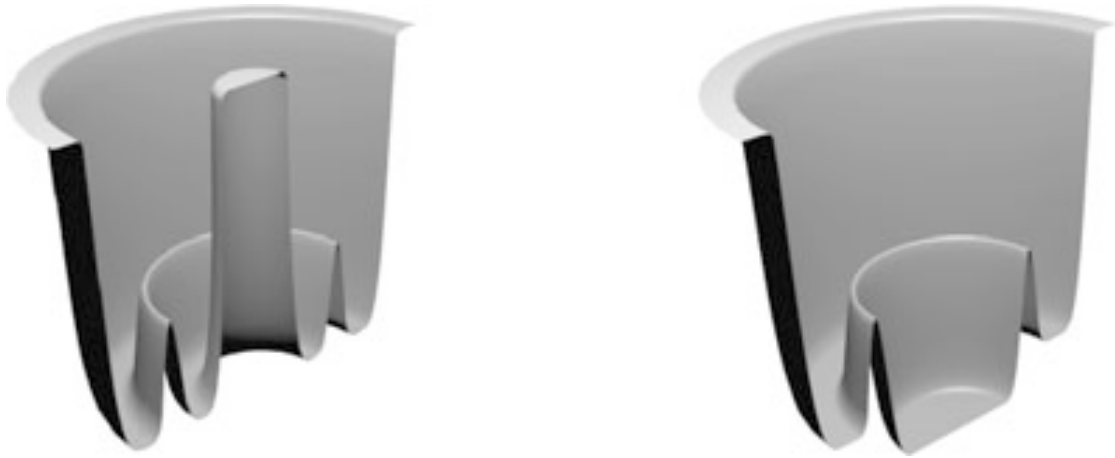


RYSUNEK 2.1: Funkcje falowe i czas relaksacji dla układów o różnej geometrii, lewy (prawy) górny róg zawiera funkcje falowe dla różnych orbitalnych liczb kwantowych l dla kropki (pierścienia) kwantowej. Panel dolny ukazuje zależność czasu relaksacji od parametru k definiującego kształt potencjału. Dla kropki wynosi on zero, bliski jedynce odpowiada pierścieniowi [58]. Czasy relaksacji dla kropek kwantowych są nawet o dwa rzędy wyższe niż w przypadku pierścieni

z tego jaki kształt nadano kropce w procesie produkcji, oraz ile elektronów się w niej znajduje. Dla kropek sferycznych i pierścieni funkcje stanu podstawowego i wzbudzonych nie różnią się znacząco.

Układy dwóch i więcej kropek/pierścieni kwantowych ułożonych w jednej linii, zarówno poziomej jak i pionowej, oferują o wiele większe możliwości [59]. Można zmieniać różnice potencjału pomiędzy nimi przesuując elektrony z jednej kropki do drugiej (również jednoelektronowe układy, wtedy przesuwana jest funkcja falowa). Ich funkcje falowe różnią się w zależności od stanu, przy odpowiednich napięciach na bramkach różnice te mogą być wyraźne. Struktury takie stają się o wiele bardziej sterowalne, dzięki czemu możemy manipulować parametrami układu w znaczącym stopniu.

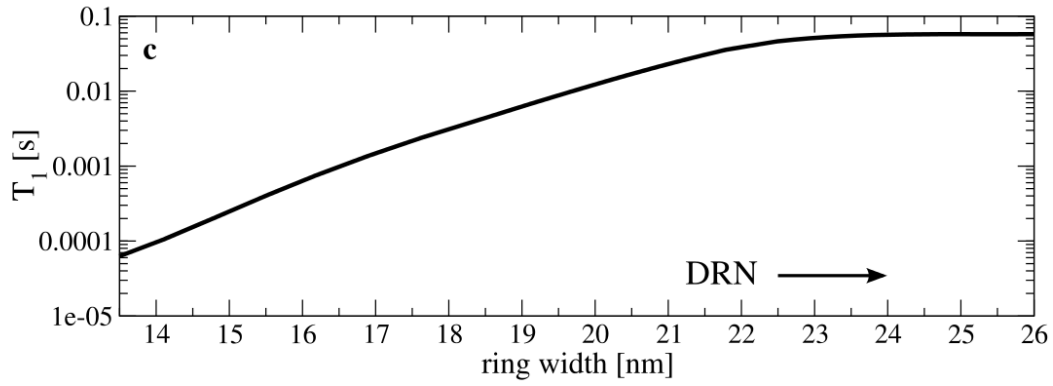
Wariantem wykorzystującym kropki i pierścienie jest połączenie wymienionych struktur w taki sposób, że pierścień otacza kropkę kwantową (DRN - Dot Ring Nanostructure), bądź pierścień (double ring) [60] i jest oddzielony od niej barierą potencjału (rysunek 2.2).



RYSUNEK 2.2: Podwójny pierścień i kropka otoczona pierścieniem [58]

Podwójny pierścień (double ring), czyli pierścień kwantowy otoczony drugim pierścieniem jest modyfikacją układu dwóch pierścieni pozwalającym na przynajmniej częściowe odseparowanie funkcji falowych od siebie, a zatem wydłużenie czasu relaksacji (dokładna analiza znajduje się w rozdziale 3). Manipulując szerokością wewnętrznego pierścienia można zmienić czas relaksacji nawet o kilka rzędów, dokładną zależność widać na rysunku 2.3. Przy odpowiednio szerokim pierścieniu można mówić w przybliżeniu o DRN, dla którego otrzymujemy dłuższe czasy relaksacji.

Kontrolując niezależnie wysokość potencjału obydwu części możemy przesuwając funkcje falowe pomiędzy wymienionymi elementami. Dla odpowiednich napięć różnica pomiędzy stanem podstawowym a wzbudzonym jest wyraźna. Podobnie jak w przypadku umieszczenia układów obok siebie jesteśmy w stanie manipulować tym, w której części znajdują się poszczególne stany, oraz jak bardzo się pokrywają. W odróżnieniu od układów połączonych pojemnościowo w sposób szeregowy tunelowanie z i do elektrod może nastąpić do dowolnej części układu co wymaga podejścia odmiennego od tego stosowanego dla pojedynczej kropki/pierścienia czy

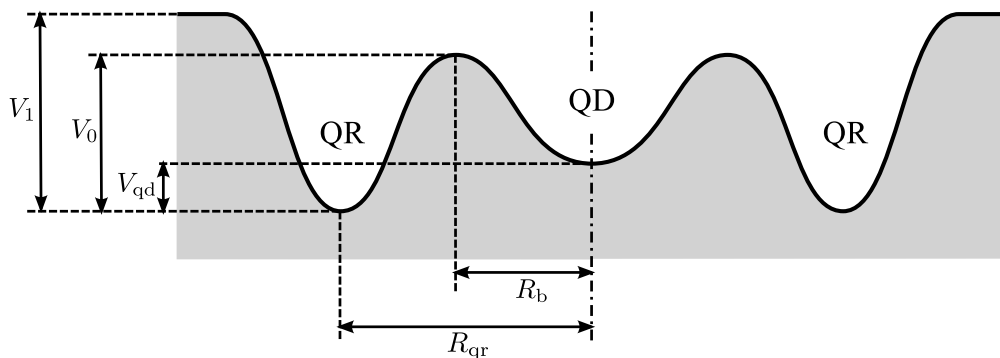


RYSUNEK 2.3: Czas relaksacji dla układów koncentrycznych z rysunku 2.2. W miarę zbliżania w prawą stronę pierścień wewnętrzny staje się na tyle szeroki, że można go zastąpić kropką [58]. Układy złożone z kropki i pierścienia posiadają dłuższe czasy relaksacji od podwójnych pierścieni.

liniowego układu wymienionych, ale zapewnia lepszą sterowalność a także szereg ciekawych zjawisk, które zostaną omówione w dalszych rozdziałach.

2.1 Dot Ring Nanostructure - potencjał definiujący

Układ złożony z pierścienia i kropki kwantowej można opisać za pomocą szeregu wymienionych poniżej parametrów związanych z względnym rozmiarem oraz potencjałem poszczególnych części (przyjęto, że potencjał środka pierścienia wynosi 0 meV i względem niego zostaną podane pozostałe wartości). Przekrój potencjału definiującego znajduje się na rysunku 2.4.



RYSUNEK 2.4: Schemat przekroju poprzecznego DRN. Poszczególne skróty zostały wyjaśnione poniżej.

Potencjał układu zamodelowano za pomocą następującej formuły wynikającej z rozwiązania równania Laplace'a. Opisuje ona potencjał (V) w funkcji odległości od środka układu (r):

$$V(r) = \begin{cases} V_{\text{QD}} + (V_0 - V_{\text{QD}}) \exp[-b_w(r - r_B)^\beta] & \text{dla } r < r_B, \\ V_1 \{1 - \exp[-(r/r_0)^\alpha]\} + V_0 \exp[-b_w(r - r_B)^\beta] & \text{dla } r > r_B, \end{cases} \quad (2.2)$$

gdzie:

- V_{QD} : potencjał kropki kwantowej - jeśli jest dodatni, to potencjał kropki jest wyższy od potencjału pierścienia i na odwrót. Jest sterowany dzięki bramce, przez co możemy manipulować "położeniem" kropki i pierścienia względem siebie.
- V_0 : wysokość bariery oddzielającej pierścień od kropki. Odgrywa istotne znaczenie w inżynierii funkcji falowych, a także jest powodem przewagi DRN nad klasyczną kropką kwantową (szczegóły zostaną omówione w dalszej części pracy).
- V_1 : wysokość bariery zewnętrznej. Jeśli nie zaznaczono inaczej, w obliczeniach przyjęto wartość 90 meV.
- r_B : położenie środka bariery względem środka układu. Determinuje proporcje kropki i pierścienia względem siebie. Jeśli nie zaznaczono inaczej, środek bariery znajduje się w punkcie $\frac{1}{2}r_0$.
- r_0 : promień całej struktury.
- α : współczynnik odpowiadający za stromość bariery V_1 , im większy tym bardziej stroma bariera (w obliczeniach przyjęto 2).
- β : współczynnik odpowiadający za stromość bariery V_0 , im większy tym bardziej stroma bariera (w obliczeniach przyjęto 30).

- b_w : współczynnik determinujący szerokość bariery V_0 , im mniejszy tym szersza bariera (w obliczeniach przyjęto 0.012 dla DRN o promieniu wynoszącym 70 nm lub więcej oraz 0.02 dla DRN o promieniu 50 nm).

Wybór materiału z jakiego wykonano poszczególne części determinuje efektywną masę elektronu (dla GaAs wynosi ona 0.067 masy spoczynkowej), a w polu magnetycznym może wpłynąć na kształt potencjału definiującego (więcej w rozdziale 5).

2.2 DRN - inżynieria funkcji falowych

W odróżnieniu od klasycznej kropki kwantowej kształt potencjału definiującego go strukturę ulega znacznym modyfikacjom w zależności od napięcia przyłożonego do bramek, a każdy z parametrów układu wpływa w mniej lub bardziej znaczący sposób na spektrum układu. Elektron, w zależności od konfiguracji napięcia na bramkach, może obsadzić kropkę kwantową, pierścień bądź być rozmyty pomiędzy obydwoma częściami. Wzajemne położenie funkcji względem siebie opisywane jest przez współczynnik nakładania: tzw. *overlap factor*. Jest on tym większy im bardziej zbliżony jest kształt funkcji falowych. Pośrednio zmianom ulega też różnica energetyczna pomiędzy stanami, w części pierścieniowej jest wyraźnie niższa niż w części kropkowej. Rozmieszczenie funkcji falowej stanu podstawowego bądź wzbudzonego może ulec diametralnym zmianom przy drobnych manipulacjach napięciem na bramkach, pociągając za sobą zmiany własności makroskopowych. W ogólności kształt i wzajemne ułożenie funkcji falowych determinują między innymi:

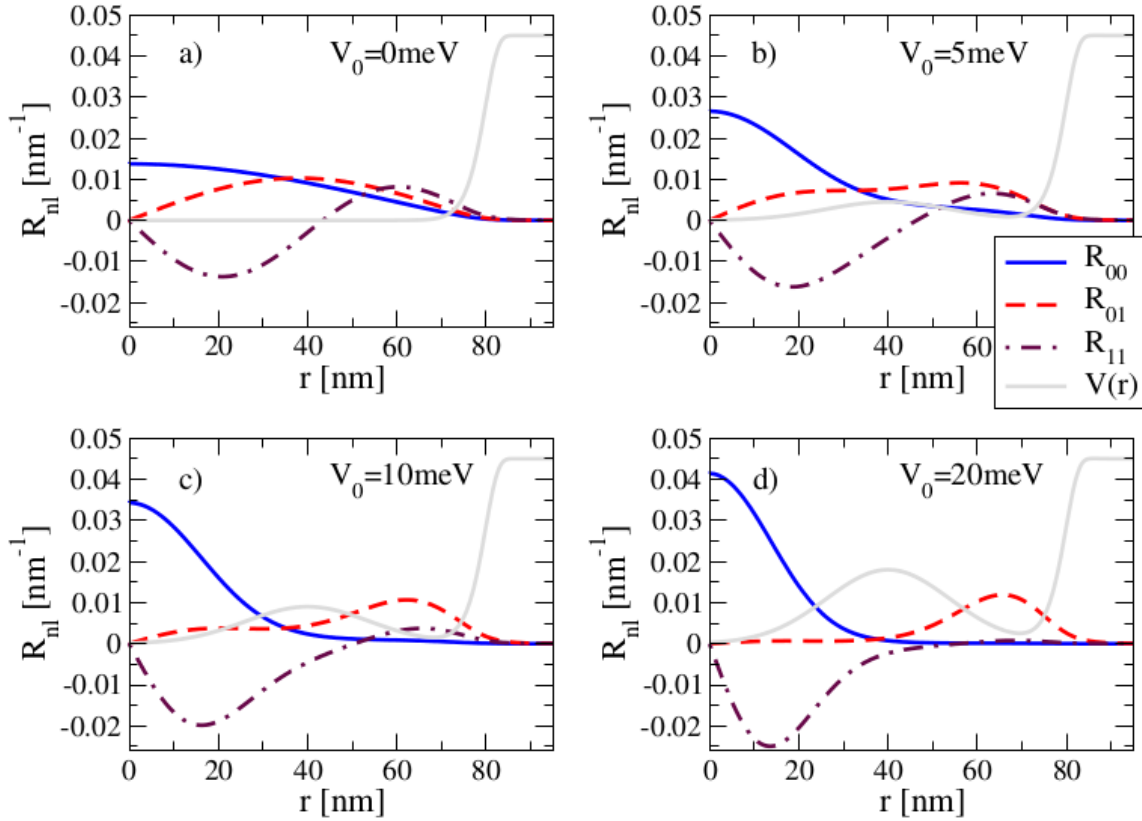
- czas relaksacji spinowej: im większe pokrywanie się funkcji falowych i mniejsza różnica energetyczna pomiędzy stanami tym krótszy czas relaksacji,
- czas relaksacji orbitalnej: większe pokrywanie się funkcji falowych i większa różnica energetyczna stanów owocują większą szybkością relaksacji,

- poziom absorpcji fotonów: układ jest transparentny dla fotonów o konkretnej częstotliwości, zmiana napięcia na bramce zmienia częstotliwość fotonów, dla których układ jest przezroczysty (więcej w dodatku B),
- transport ładunku: stany pierścieniowe są lepiej sprzężone z elektrodami, a zatem prąd ma wyższe natężenie niż w przypadku stanów znajdujących się w pierścieniu.

Podstawowym parametrem wykorzystywanym w manipulacji funkcjami falowymi jest względna różnica potencjałów kropki i pierścienia, kontrolowana za pomocą zewnętrznej bramki, czyli potencjał V_{QD} . Omówiony zostanie także wpływ wysokości i kształtu bariery na powyższe cechy.

2.2.1 Wpływ parametrów bariery wewnętrznej na kształt funkcji falowych

Bariera oddzielająca kropkę od pierścienia jest powodem, dla którego DRN ma przewagę nad klasyczną kropką w większości sytuacji. Kształt bariery, czyli to jak bardzo jest stroma i szeroka definiuje efektywny rozmiar kropki i pierścienia. Dla studni o przekroju kwadratowym funkcje falowe zachowują się w podobny sposób jak w studni gaussopodobnej. Położenie bariery względem środka układu definiuje proporcje pierścienia i kropki (określając jednocześnie ich promień). Im bliżej środka umieszczona jest bariera, tym mniejsza jest kropka, a większy pierścień. Dla większości cech struktury (jak czas relaksacji) oraz manipulacji funkcjami falowymi (więcej w dalszej części pracy) najkorzystniejsza jest sytuacja gdy położenie środka bariery jest równe połowie całkowitego promienia struktury, a zatem promień kropki i szerokość pierścienia są takie same. Im wyższa i szersza bariera, tym lepiej stany są odseparowane od siebie. Bariera również nie może być za wysoka, gdyż wtedy otrzymujemy dwie osobne struktury. Optymalna wysokość bariery dla struktury o promieniu 70 nm to około 20 meV. Mniejsze struktury posiadają większe różnice energetyczne pomiędzy stanami, stąd potrzeba wprowadzenia wyższej bariery (45 meV dla układu o promieniu 50 nm).

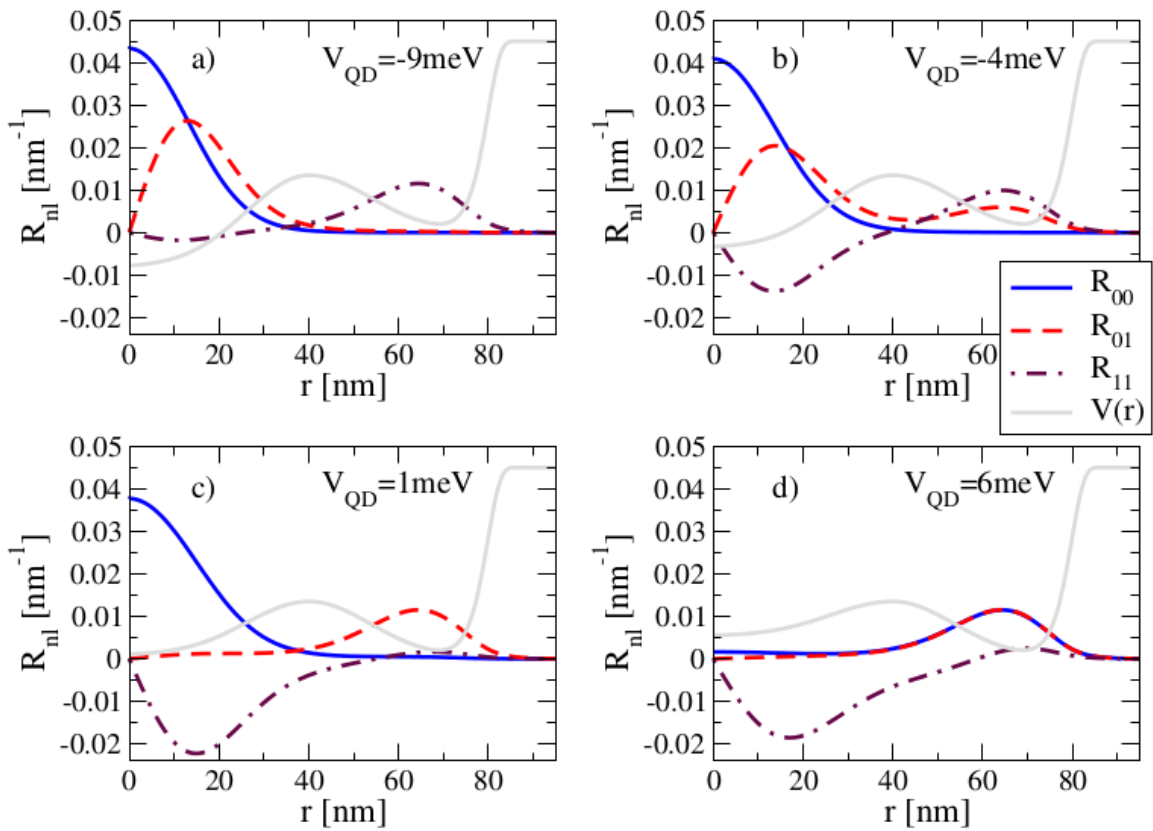


RYСУNEK 2.5: Funkcje falowe dla różnych wartości V_0 [46]. Jasnoszara linia obrazuje kształt potencjału, niebieska ciągła stan podstawowy, czerwona przerywana pierwszy stan wzbudzony. Panel a) dotyczy układu bez bariery czyli kropki kwantowej. W miarę zwiększania wysokości bariery funkcje falowe ulegają silniejszej separacji. Potencjał na zewnątrz struktury wynosi 45 meV.

W przypadku gdy kropka i pierścień posiadają ten sam potencjał (czyli $V_{\text{QD}} = 0$) wysokość bariery wpływa na rozkład funkcji falowych w następujący sposób. Dla zerowej wysokości bariery (rysunek 2.5 a)) funkcje falowe przypominają te znajdujące się w klasycznej kropce, układ de facto stanowi studnię potencjału o płaskim dnie. W miarę wzrostu wysokości bariery stany ulegają zmianom, co obrazują panele b), c) i d) na rysunku 2.5. Dla bariery o wysokości 5 meV różnica ta jest nieznaczna, jednak już w przypadku 10 meV stany są wyraźnie odseparowane. Stan podstawowy skupia się w kropce, a wzbudzony w pierścieniu. Bariera o wysokości 20 meV sprawiła, że współczynnik nakrywania jest zaniedbywany. Dalsze zwiększanie bariery nie wpływa w sposób znaczący na rozkład funkcji.

2.2.2 Wpływ potencjału kropki na kształt funkcji falowych

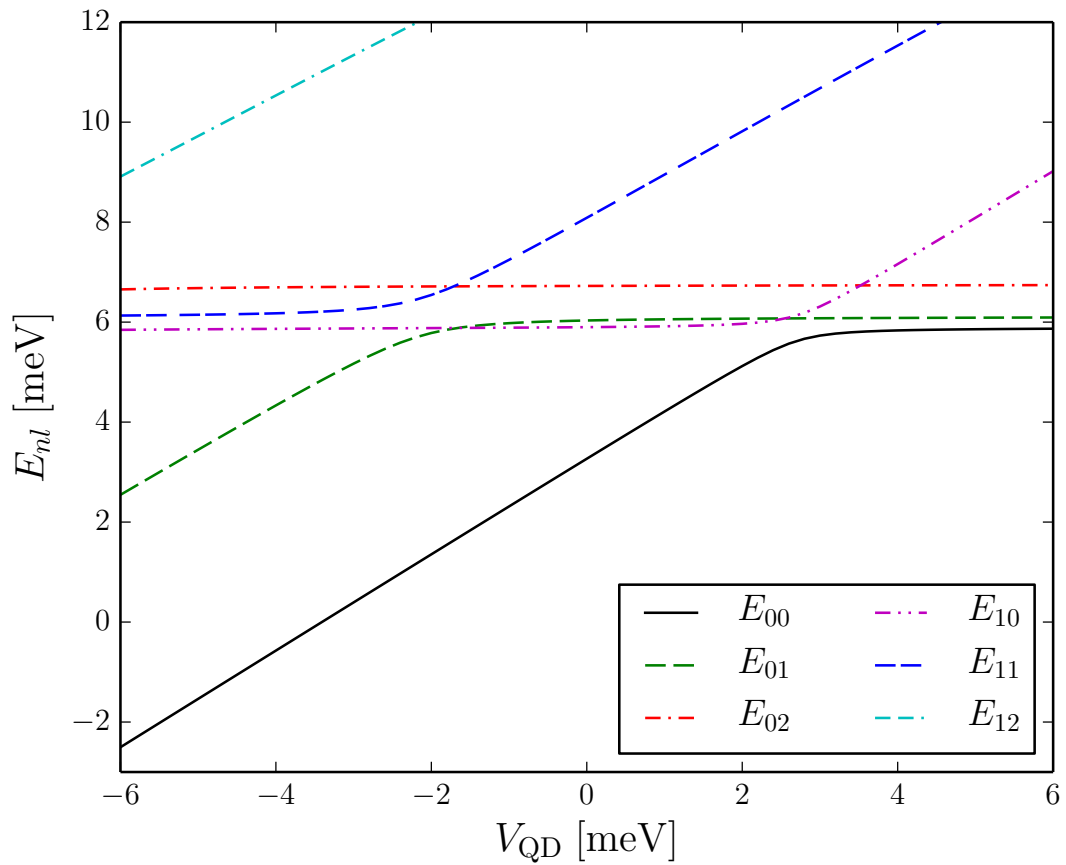
Potencjał na elektrodach wpływa na kształt struktury, a zatem na stany własne układu. Manipulując napięciem na bramce sprzężonej z kropką możemy zmieniać jej potencjał względem pierścienia. Im wyższy (niższy) potencjał kropki kwantowej tym większa część funkcji falowej stanu podstawowego znajduje się w pierścieniu (kropce). Poszczególne konfiguracje przedstawiono na rysunku 2.6 i omówiono poniżej.



RYSUNEK 2.6: Funkcje falowe dla różnych wartości V_{QD} [46]. Jasnoszara linia obrazuje kształt potencjału, niebieska ciągła stan podstawowy, czerwona przerywana pierwszy stan wzbudzony. Manipulacja wysokością potencjału dna kropki umożliwia przesuwanie funkcji stanu podstawowego i wzbudzonego z kropki do pierścienia i odwrotnie. Im wyższe V_{QD} tym korzystniejsze energetycznie jest umiejscowienie funkcji falowej w pierścieniu.

Gdy potencjał kropki jest dużo niższy od potencjału pierścienia zarówno stan podstawowy jak i wzbudzony znajdują się w kropce. Jeśli potencjał kropki i pierścienia są zbliżone, to stan podstawowy w przeważającej części okupuje kropkę,

podczas gdy dla stanu wzbudzonego korzystniejsze jest ulokowanie się w pierścieniu. W końcu, dla sytuacji gdy potencjał kropki jest znacznie wyższy od pierścienia zarówno stan podstawowy jak i pierwszy stan wzbudzony skupione są w pierścieniu i układ ma efektywnie własności pierścienia. W zależności od napięcia jest możliwe odseparowanie funkcji falowej stanu podstawowego i pierwszego wzbudzonego, bądź umieszczenie obydwu funkcji w pierścieniu bądź kropce. Dla struktury wykonanej z jednego rodzaju materiału nie ma możliwości umieszczenia stanu podstawowego w pierścieniu, podczas gdy pierwszy stan wzbudzony byłby w kropce. Jest to osiągalne dopiero przy wykorzystaniu DRN wykonanego z CMS (więcej w rozdziale 1.2) i po przyłożeniu pola magnetycznego (więcej w rozdziale 5).



RYSunEK 2.7: Widmo energetyczne jako funkcja V_{QD} [61]. Spektrum dla układu o promieniu 70 nm, barierze umieszczonej w połowie układu i o wysokości 20 meV. Poszczególne linie odpowiadają stanom o podanych liczbach kwantowych n i l . Liniowy (stały) charakter widma wynikający z rozwiązania równania Schrödingera występuje, gdy znaczna część funkcji znajduje się w kropce (pierścieniu). Przecięcie stanów 01 i 10 nie występuje dla układów o niższej barierze potencjału. Bariera zewnętrzna wynosi 45 meV, zaś wewnętrzna 20 meV.

Na podstawie spektrum energetycznego, rysunek 2.7, można oszacować lokalizację stanów własnych. Stany znajdujące się w kropce kwantowej są czułe na jej potencjał, stąd liniowy charakter widma energetycznego dla tych części, stany w pierścieniu zaś niemal nie odczuwają wpływu kropki, zatem wartość ich energii jest stała, niezależnie od przyłożonego napięcia.

Zmiany napięcia bramki odpowiadającej za wysokość dna kropki są kwintesencją inżynierii funkcji falowej. Drobne zmiany mogą prowadzić do znaczących różnic w rozkładzie funkcji falowych. Bardzo wysokie, bądź bardzo niskie wartości napięcia na bramce (tzn. gdy różnica pomiędzy kropką a pierścieniem wynosi ponad 6 meV) czyni z układu efektywnie kropkę bądź pierścień.

2.3 Porównanie metod obliczeniowych

Znajomość funkcji falowych umożliwia wyliczenie szeregu parametrów charakteryzujących strukturę takich jak czas relaksacji czy natężenie prądu. Niestety w przeciwieństwie do klasycznej kropki kwantowej rozwiązanie analityczne równania Schrödingera jest niemożliwe, w związku z czym stosuje się obliczenia numeryczne [62, 63]. W tym celu posłużono się następującymi metodami:

- metoda Numerova połączona z metodą strzałów,
- zapisanie równania w formie macierzowej i wykorzystanie algorytmu Lanczosa do diagonalizacji,
- wykorzystanie pakietu Kwant [64] pozwalającego na uwzględnienie wpływu elektrod na potencjał.

W celu sprawdzenia prawidłowości przeprowadzonych obliczeń dla dwóch pierwszych metod, rozwiązano za ich pomocą równanie Schrödingera dla klasycznej kropki kwantowej i porównano z wynikami analitycznymi. Otrzymano zgodność dla obydwu metod. Metody zostaną przedstawione w dalszej części pracy oraz dodatku A. Struktura, dla której przeprowadzono analizę została wykonana z GaAs

(efektywna masa elektronu 0.067 masy spoczynkowej). Promień zewnętrzny wynosi 60 nm.

2.3.1 Metoda Numerova

Zachowanie symetrii cylindrycznej pozwala na przejście z układu kartezjańskiego do cylindrycznego, a następnie separację zmiennych:

$$\Psi_{nl}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r) \exp(il\phi). \quad (2.3)$$

Hamiltonian w tym układzie wygląda następująco:

$$H = \frac{1}{2m^*} \mathbf{p}^2 + V(r). \quad (2.4)$$

Spektrum energii jest dyskretne i można je opisać za pomocą liczb kwantowych:

- n : główna liczba kwantowa, numerująca stan elektronu z uwagi na ruch radialny. Przyjmuje wartości $n = 0, 1, 2, 3, \dots$
- l : numerująca stany z uwagi na moment pędu elektronu. Przyjmuje wartości $l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$

Kątowa część równania Schrödingera jest możliwa do analitycznego rozwiązania i znajduje się poniżej.

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{d^2 Y(\theta)}{d\theta^2} \right] = Y(\theta) \quad (2.5)$$

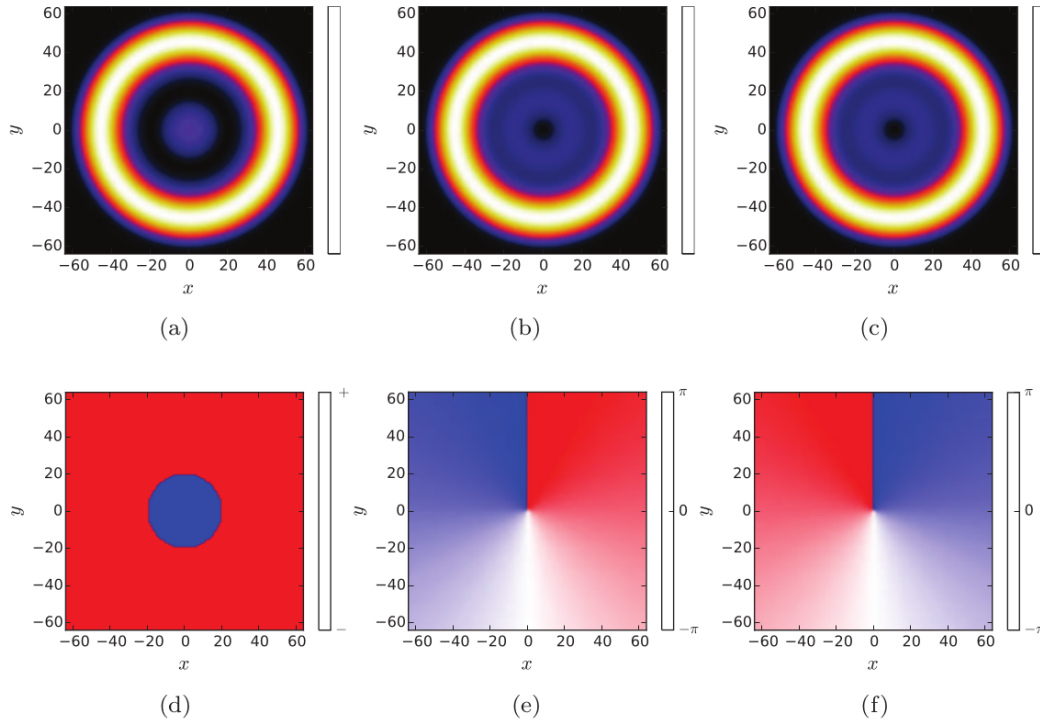
Radialna część równania Shrodingera wygląda następująco:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{d}{dr} + \frac{d^2}{dr^2} \right) R(r) + V(r)R(r) = E(r). \quad (2.6)$$

Stosując podstawienie $f(r) = \sqrt{r}R(r)$ i dokonując przeliczeń równanie przybiera ona postać:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar} [E - V(r)] - \frac{l^2}{r^2} + \frac{1}{4r^2} \right\} f(r) = 0. \quad (2.7)$$

Równanie to można rozwiązać metodą Numerova [65, 66] (więcej w dodatku A). Jest to metoda iteracyjna, która w połączeniu z metodą bisekcji bądź strzałów [67] pozwala wyliczyć przybliżoną postać funkcji falowej.



RYSUNEK 2.8: Funkcje falowe otrzymane metoda Numerova dla $V_{\text{QD}} = 0$. Każda para przedstawia kształt radialnej części funkcji falowej (górną) oraz fazę (dół). Od lewej kolejno stan podstawowy (a), pierwszy wzbudzony, który z uwagi na liczbę $l = 1$ jest zdegenerowany (b i c).

Zaletą metody jest dokładność i szybkość. Otrzymane w ten sposób stany (rysunek 2.8) nie są zdegenerowane, jednak uwzględnienie wartości przyjmowanych przez liczbę l daje nam degenerację stanów. Radialna część funkcji falowej otrzymana tą metodą jest rzeczywista. Metoda ta może być stosowana tylko do układów o symetrii sferycznej.

2.3.2 Macierzowa postać równań

Dwuwymiarowe funkcje falowe oraz potencjał można zapisać w sposób dyskretny:

$$\Psi(x, y) \rightarrow \Psi(i, j), \quad V(x, y) \rightarrow V(i, j),$$

gdzie (i,j) numeruje węzły sieci. Określona w ten sposób funkcja falowa przyjmuje postać macierzy o wymiarze $N \times N$ o stałej sieci a . W celu otrzymania równania macierzowego zastosowano następującą zamianę indeksów:

$$\Psi(i, j) \rightarrow \Psi(k), \quad V(i, j) \rightarrow V(k), \quad \text{gdzie } k \equiv i + (j - 1)N.$$

Zapisując drugą pochodną występującą w hamiltonianie za pomocą ilorazu różnicowego otrzymujemy macierz, której wartości i stany własne otrzymane poprzez diagonalizację są rozwiązaniem równania Shrödingera. Hamiltonian czyli macierz H jest macierzą pięcioprzekątniową:

- Na głównej przekątnej posiada elementy równe:

$$H(i, i) = 2 \frac{\hbar^2}{m^*(a)^2} + V(i), \quad (2.8)$$

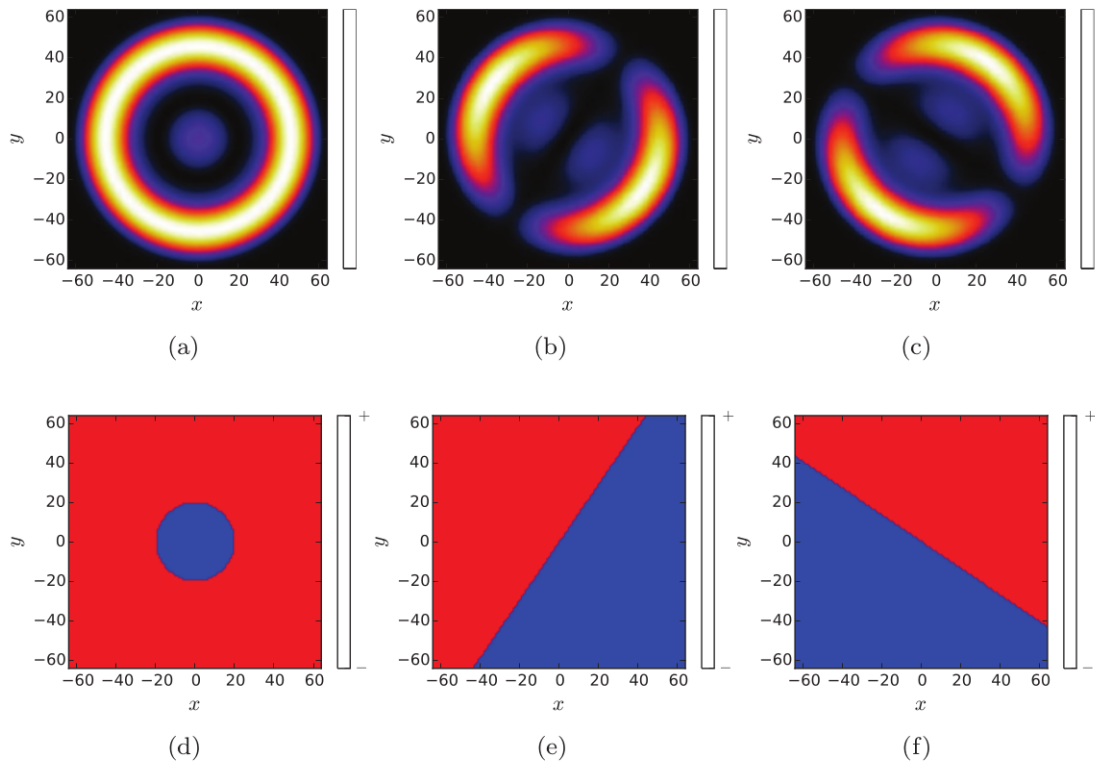
- na nadprzekątnej i podprzekątnej elementy wynoszą

$$H(i, i \pm 1) = \frac{-\hbar^2}{2m^*(a)^2}, \quad (2.9)$$

- na przekątnych oddalonych o N rzędów od głównej przekątnej elementy wynoszą:

$$H(i, i \pm N) = \frac{-\hbar^2}{2m^*(a)^2}. \quad (2.10)$$

Zapisanie funkcji falowej na N węzłach powoduje, że macierz do diagonalizacji jest wymiaru N^2 . Zwiększenie dokładności obliczeń poprzez zmniejszenie kroku, a zatem zwiększenie wymiaru macierzy, powoduje wykładniczy wzrost czasu obliczeń.

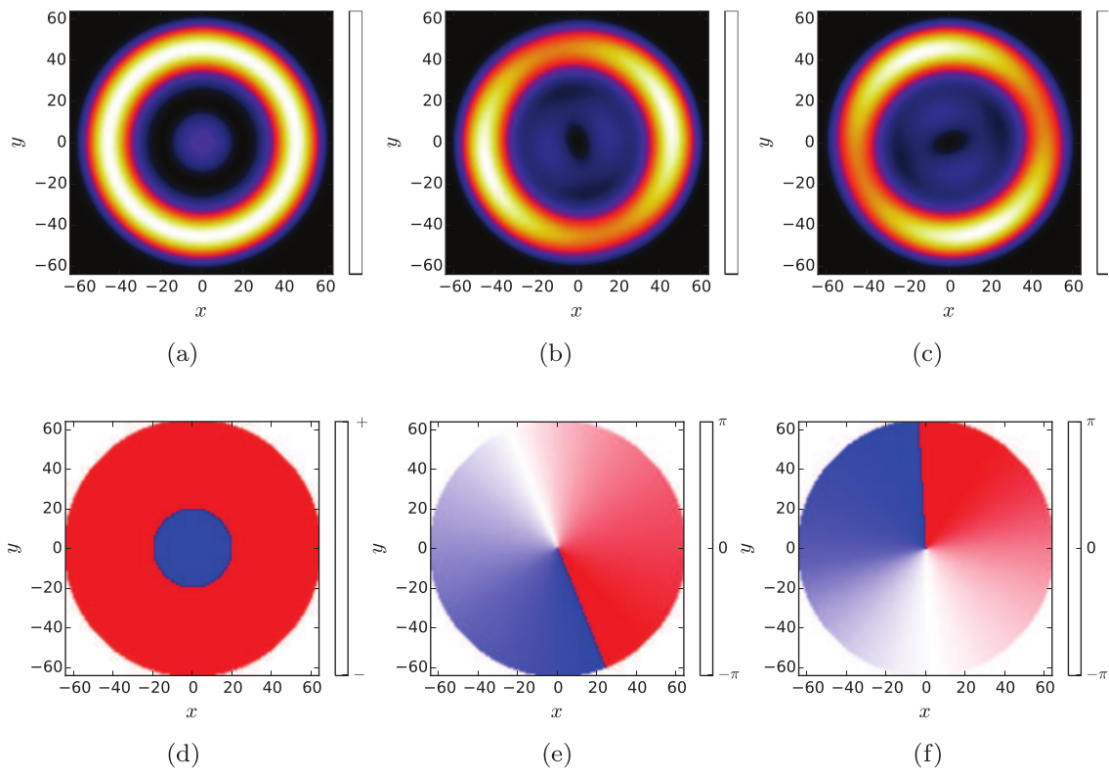


RYSUNEK 2.9: Funkcje falowe otrzymane przy użyciu algorytmu Lanczosa dla $V_{\text{QD}} = 0$. Każda para przedstawia kształt radialnej części funkcji falowej (góra) oraz fazę (dół). Od lewej kolejno stan podstawowy (a), pierwszy wzbudzony, który z uwagi na liczbę $l = 1$ jest zdegenerowany (b i c).

Metoda Lanczosa [68] (więcej w dodatku A) pozwala znacząco skrócić czas obliczeń (przykładowo na laptopie HP z procesorem Intel Core i5 - 4210M CPU 2.60GHz x 4 z 69 sekund dla układu rozpisanego na macierzy 50×50 do 0.05 sekundy) umożliwiając zwiększenie wymiaru układu (np. układ rozpisany na macierzy 1000×1000 jest rozwiązywany w 63 sekundy), co pozwala na większą dokładność otrzymanych wyników. Wadą jest konieczność dopasowania liczby iteracji do konkretnego przypadku, a także sztuczna degeneracja stanów przy zbyt dużej liczbie kroków. Metoda ta sprawdza się jedynie dla kilku pierwszych stanów własnych. Z uwagi na zastosowanie do obliczeń losowego wektora początkowego faza również jest losowa. Funkcje falowe otrzymane dzięki tej metodzie znajdują się na rysunku 2.9.

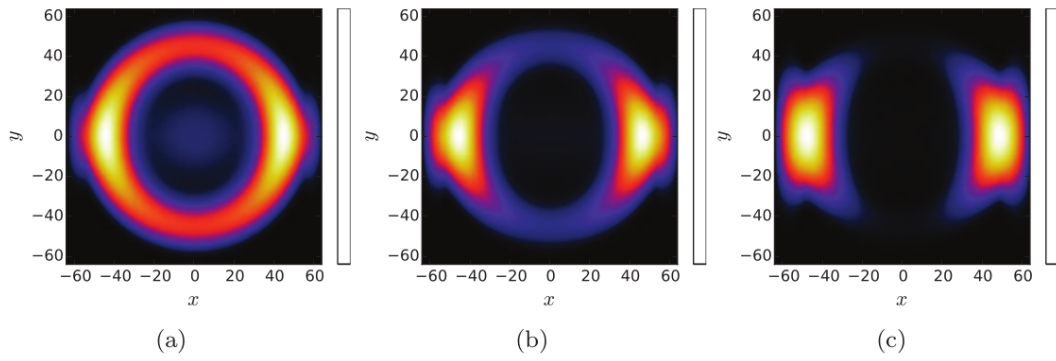
2.3.3 Pakiet Kwant

Kwant jest bezpłatnym pakietem opartym o język programowania Python, służącym do przeprowadzania obliczeń związanych z transportem ładunku w nanoukładach. Są to obliczenia prowadzone w oparciu o model ciasnego wiązania gdzie, w odróżnieniu od metody Numerova, elektron nie jest swobodny. Do obliczeń zastosowano model ciasnego wiązania z przeskokami tylko do najbliższych sąsiadów, kwadratową sieć oraz potencjał onsite zdefiniowany w poprzednim rozdziale. Otrzymane rezultaty znajdują się na rysunku 2.10.



RYSUNEK 2.10: Funkcje falowe otrzymane przy użyciu pakietu Kwant dla $V_{QD} = 0$. Każda para przedstawia kształt radialnej części funkcji falowej (góra) oraz fazę (dół). Od lewej kolejno stan podstawowy (a), pierwszy wzbudzony (b i c).

Pakiet ten w odróżnieniu od metody Lanczosa i Numerova uwzględnia wpływ elektrod na kształt funkcji falowych (rysunek 2.11), a także elektron w tym przybliżeniu nie może być dłużej traktowany jako swobodny ze względu na zastosowanie wspomnianego powyżej modelu ciasnego wiązania. Funkcje falowe stanów wzbudzonych, tak długo jak układ jest izolowany, otrzymane tą metodą posiadają amplitudę zależną od kąta.



RYSUNEK 2.11: Funkcja falowa stanu podstawowego dla słabo (a), umiarkowanie (b) i silnie (c) sprzężonego DRN z elektrodami.

Silne i umiarkowane sprzężenie układu z elektrodami (rysunek 2.11 b) i c)) powoduje znaczną deformację potencjału (a zatem i funkcji falowych) czym zaburza symetrię układu. Dla słabego sprzężenia układu z elektrodami wpływ ten jest zanedbywalny.

2.3.4 Wnioski z porównania

Obliczenia przeprowadzono zakładając, że jedynie wysokość potencjału dna kropki ulega zmianie, zatem dla każdej wartości V_{QD} istniała konieczność przeprowadzenia obliczeń. W związku z tym oprócz dokładności obliczeń ważna była szybkość algorytmu.

Metoda macierzowa, pozwalająca na otrzymanie spektrum wraz z funkcjami dla dowolnego potencjału jest czasochłonna i działa dla macierzy o niskich wymiarach co nie sprzyja dokładności obliczeń. Zastosowanie algorytmu Lanczosa umożliwia obejście problemu, ale działa tylko dla stanu podstawowego i niższych wzbudzonych. Otrzymane tą metodą wyniki są jeszcze mniej dokładne niż te uzyskane przy bezpośredniej diagonalizacji (podaje przybliżone wyniki dla obliczeń numerycznych). W dodatku nie uwzględnia wpływu elektrod, a wybór sieci w mniej lub bardziej znaczącym stopniu zniekształca potencjały oparte na okręgach.

Metoda Numerova jest stosunkowo szybka, dostarcza dokładnych rozwiązań, ale działa tylko dla układów o symetrii cylindrycznej bądź sferycznej i nie uwzględnia wpływu elektrod. Układ będący tematem tej pracy posiada taką symetrię i jest na tyle słabo sprzężony z elektrodami, że ich wpływ można często zaniedbać.

Pakiet Kwant pozwala na obliczenie funkcji falowych dla dowolnego układu i uwzględnia wpływ elektrod. Szybkość obliczeń również jest zadowalająca. Niestety otrzymane funkcje trudno zastosować w obliczeniach poza pakietem z uwagi na specyficzną numerację węzłów. Stanowi to problem w sytuacji gdy istnieje potrzeba wyliczenia czynnika przykrywania się funkcji (tzw. *overlap factor*) wpływającego na większość parametrów układu.

W związku z tym w obliczeniach zawartych w kolejnych rozdziałach wykorzystano funkcje falowe otrzymane metodą Numerova.

Rozdział 3

Relaksacja spinowa i orbitalna

Relaksacja jest procesem powrotu układu do stanu o niższej energii, w szczególności do stanu podstawowego. Kontrola długości życia stanów wzbudzonych jest kluczowa dla nanotechnologii. Układy o wolnej relaksacji spinowej są obiecującymi kandydatami na qubity. Szybkość relaksacji zarówno orbitalnej jak i spinowej wpływa także na transport ładunku. Stany wzbudzone mają inne sprzężenie z elektrodami niż stan podstawowy w związku z tym ważne jest określenie jak długo elektron pozostaje w danym stanie.

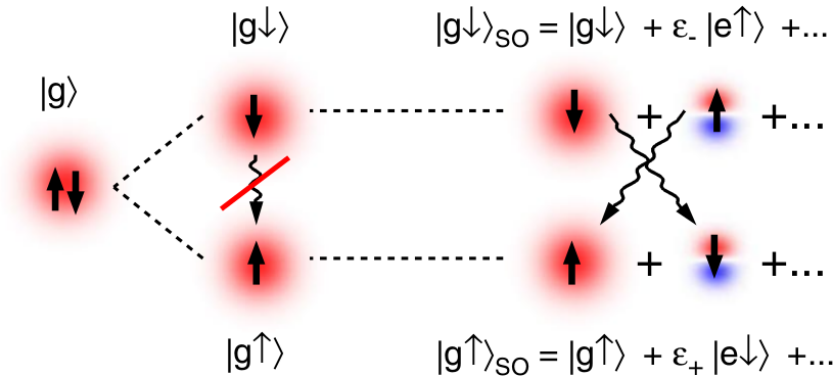
3.1 Relaksacja spinowa

W sytuacji braku pola magnetycznego stany są zdegenerowane ze względu na spin. Efekt Zeemana [69] znosi degenerację stanów ze względu na m_J , przez co rozszczepia stan $|\zeta\rangle$ na $|\zeta, \uparrow\rangle$ i $|\zeta, \downarrow\rangle$. W przypadku układów wykonanych z jednolitego materiału wiąże się to z uwzględnieniem dodatkowego członu w Hamiltonianie (wpływ pola magnetycznego na potencjał definiujący został omówiony w rozdziale 5). Różnica energetyczna pomiędzy stanami wynosi $\Delta = |g|\mu_B B$ a funkcje falowe pozostają takie same. Bezpośrednia relaksacja stanów o różnych spinach nie jest możliwa, zachodzi jednak poprzez fonony piezoelektryczne dzięki sprzężeniu spin-orbita [14, 70–75].

Poruszający się elektron z racji posiadania ładunku elektrostatycznego posiada moment magnetyczny związany ze spinem, na który wpływa pole magnetyczne. Z orbitalnym momentem pędu również związany jest moment magnetyczny. Obydwa momenty magnetyczne oddziałują ze sobą tym silniej im bardziej ich sumy wektorowe są zbliżone, co nosi miano *sprzężenia spin orbita (SO)* [76–79]. Nadsubtelne oddziaływanie sprzęga spin elektronu z efektywnym polem magnetycznym wytworzonym przez spin jądra (B_n), co również może spowodować dekoherencję. Dla pól znacznie silniejszych od B_n następuje wymieszanie stanów orbitalnych ze spinowymi. W ten sposób na stan $|\zeta \downarrow\rangle_{SO}$ składają się stany: $|\zeta \downarrow\rangle_{SO} = |\zeta \downarrow\rangle + \epsilon_- |e \uparrow\rangle$ (schematyczne przedstawienie sprzężenia spin-orbita znajduje się na rysunku 3.1). Wzór wyrażający energię wynikającą z oddziaływania wspomnianych momentów został wyprowadzony w oparciu o atom wodoru przez A. Thomasa na początku XX wieku i przyjmuje następującą postać [76, 80, 81]:

$$\Delta\epsilon = \frac{g}{4m^2c^2} \frac{dV(r)}{rdr} \mathbf{s} \cdot \mathbf{L}, \quad (3.1)$$

gdzie $V(R)$ jest energią potencjalną elektronu w odległości r od jądra, m masą elektronu, \mathbf{L} orbitalnym momentem pędu a s spinowym momentem pędu.



RYСУNEK 3.1: Schemat przedstawiający mechanizm relaksacji spinowej za pośrednictwem sprzężenia spin-orbita [82]. Dzięki nadsubtelnemu oddziaływaniu następuje wymieszanie stanów o przeciwnych spinach np $|00 \downarrow\rangle$ z $|01 \uparrow\rangle$, dzięki czemu możliwa jest relaksacja spinowa.

Relaksacja spinowa zależy od kilku czynników. Część z nich wynika z rodzaju materiału, z jakiego wykonano strukturę, jak czynnik żyromagnetyczny g i sprzężenie spinowo-piezoelektryczne, a także pola magnetycznego w jakim się znalazła. Rozmiar struktury także wpływa na czas relaksacji, im mniejsza struktura, tym

dłuższy czas relaksacji. Wzajemne ułożenie funkcji falowych stanów wzbudzonych i podstawowego oraz różnice energetyczne determinuje czas relaksacji, zmieniając go nawet o kilka rzędów wielkości.

W oparciu o mechanizm Dresselhaus [83] szybkość relaksacji w zależy od powyższych czynników w następujący sposób [73]:

$$w = \frac{\Delta_Z^5}{\eta} \left(\sum_{n,l} \frac{\Xi_{nl}^2}{\Delta_{nl}} \right), \quad (3.2)$$

gdzie Δ_Z (Δ_{nl}) jest różnicą energetyczną wynikającą z rozszczepienia Zeemana (różnicy poziomów energetycznych). Ξ jest to współczynnik przykrywania się funkcji falowych zdefiniowany wzorem:

$$\Xi_{00,nl} \equiv \Xi_{nl} = \int_0^\infty R_{00}^* R_{nl} r^2 dr, \quad (3.3)$$

zaś sprzężenie spinowo-piezoelektryczne η opisuje poniższa formuła:

$$\eta = \frac{\hbar^5}{\Lambda_p (2\pi)^4 (m^*)^2}, \quad (3.4)$$

gdzie Λ jest bezwymiarową stałą opisującą efektywną siłę sprzężenia i wynosi 0.007 dla układów GaAs, a m^* masą efektywną elektronu.

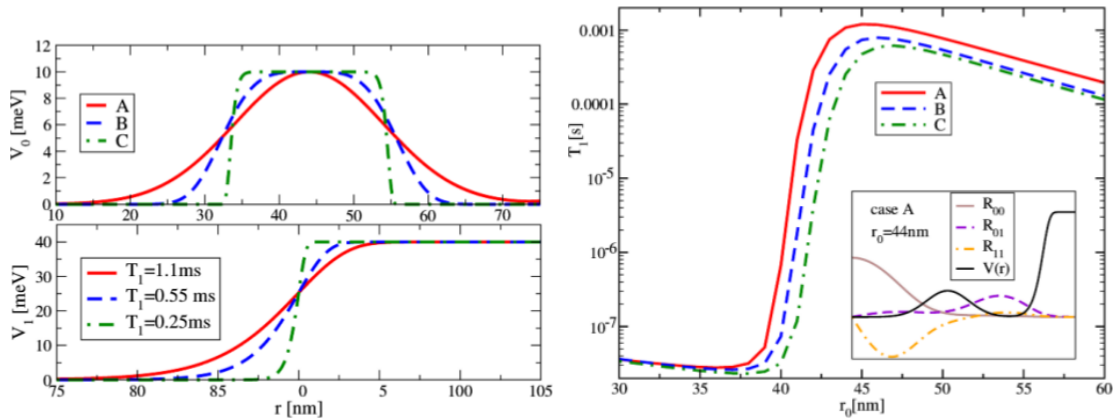
Dla pojedynczego elektronu uwzględnione są wirtualne wzbudzenia do dwóch najniższych stanów wzbudzonych 01 i 11, przy czym ze względu na wysoką różnicę energii pomiędzy drugim uwzględnianym stanem a stanem podstawowym wirtualne wzbudzenie do stanu 11 w niewielkim stopniu wpływa na czas relaksacji. Ze względu na degenerację stanów o numerach $l \neq 0$ uwzględniamy tylko stany o l większym od zera i mnożymy wynik przez dwa.

Elementem odróżniającym DRN od kropki kwantowej jest wewnętrzna bariera dzieląca strukturę na dwie części. Jej kształt i relatywne położenie względem środka układu determinuje w znacznym stopniu czas relaksacji. Przy założeniu, że

całkowity rozmiar układu jest stały, zbadano i przedstawiono w kolejnych podrozdziałach jak poszczególne parametry wpływają na szybkość relaksacji.

3.1.1 Wpływ kształtu bariery na szybkość relaksacji

Kształt i położenie bariery determinują kształt potencjału układu, przez co mają wpływ na rozkład funkcji falowych i tym samym czas relaksacji. Na lewym panelu rysunku 3.2 przedstawiono trzy kształty potencjału definiującego różniące się stromością: kwadratowy, oznaczony zielonym kolorem, oraz dwa gausopodobne zaznaczone kolorami czerwonym i niebieskim. Przy tym samym położeniu oraz tej samej szerokości połówkowej bariery czas relaksacji układu najbardziej stromego był najkrótszy (czterokrotnie krótszy od najbardziej "gładkiego").



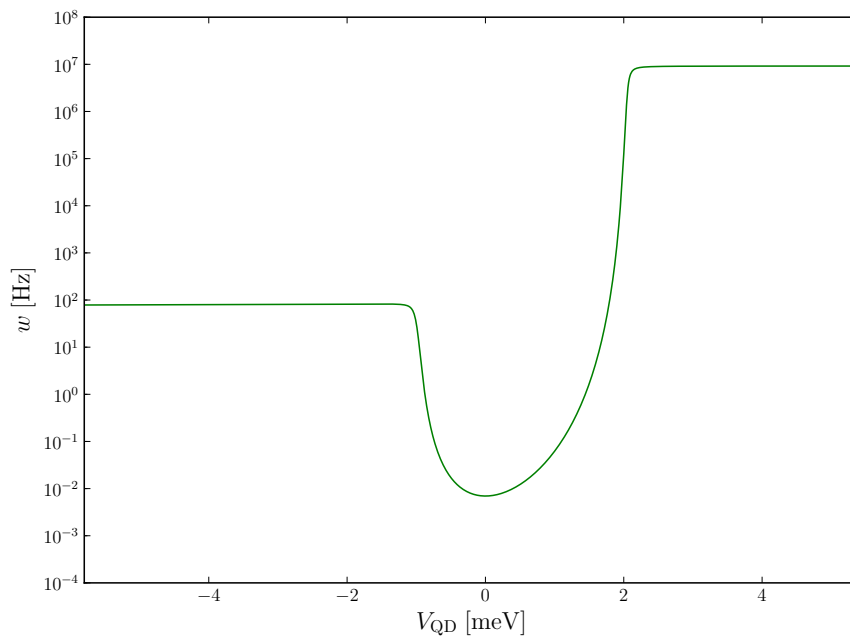
RYСУNEK 3.2: Schemat przedstawiający wpływ kształtu i położenia bariery na czas relaksacji [84]. Panele po lewej przedstawiają przekrój poprzeczny bariery wewnętrznej (góra) i zewnętrznej (dół). Panel po prawej przedstawia czas relaksacji dla podanych kształtów potencjału w funkcji położenia bariery oddzielającej pierścien od kropki z zachowaniem kolorystyki wykresów

Zmiana położenia środka bariery względem r_0 jest w stanie zmienić szybkość relaksacji o kilka rzędów. W celu znalezienia optymalnego położenia bariery przeprowadzone zostały symulacje. Optymalne warunki uzyskuje się dla bariery o środku położonym w $r_0 = \frac{1}{2}$. Przesuwanie bariery bliżej środka (brzegu) struktury powoduje efektywne zmniejszenie rozmiaru kropki (pierścienia), jednocześnie

zwiększając rozmiary pierścienia (kropki). Stany zaczynają lokować się w pierścieniu (kropce), co zwiększa nakrywanie funkcji falowych i zmniejsza różnicę energetyczną.

3.1.2 Wpływ potencjału kropki na szybkość relaksacji

Podstawową zaletą DRN jest możliwość kontroli szybkości relaksacji przy zmianie jednego parametru jakim jest potencjał kropki kwantowej za pomocą elektrody. Dzięki temu możemy w łatwy sposób zmienić szybkość relaksacji o kilka rzędów. Od dziesiątek herców dla niskich wartości V_{QD} , przez setne części herca dla V_{QD} zbliżonego do V_{QR} , po megaherce dla wysokich wartości V_{QD} . Wykres



RYSUNEK 3.3: Szybkość relaksacji spinowej jako funkcja V_{QD} . Relaksacja zmienia się o kilka rzędów wielkości, najniższa jest dla sytuacji gdy stan podstawowy i wzbudzony są odseparowane od siebie.

przedstawiający zależność szybkości relaksacji od V_{QD} przedstawiono na rysunku 3.3. Dla niskich wartości potencjału kropki kwantowej oba stany znajdują się w części wewnętrznej przez co nakładanie funkcji jest wysokie. Różnica energetyczna jest wysoka z racji geometrii układu. Różnica ta maleje w miarę zwiększania się potencjału dna kropki i osiąga niewielką wartość, gdy oba stany znajdują się

w pierścieniu, wtedy też przykrywanie funkcji jest największe, a zatem i szybkość relaksacji. Dla niewielkiego zakresu V_{QD} stany są odseparowane. Nakrywanie się funkcji osiąga minimum, przy stosunkowo wysokiej różnicy energetycznej Δ . W tym obszarze czas relaksacji jest najdłuższy.

3.2 Relaksacja orbitalna

Mechanizmem odpowiedzialnym za relaksację orbitalną jest rozpraszanie na fononach akustycznych. Fonony optyczne z racji energii znacznie większych od różnicy pomiędzy stanami odgrywają znikomą rolę w tym procesie. W obliczeniach uwzględniono oddziaływanie fononów piezoelektrycznych i deformacyjnych i przeprowadzono je w oparciu o złotą regułę Fermiego [71, 85]. Szybkość relaksacji ze stanu ψ_i , do stanu ψ_f wyraża się następującym wzorem ($w_{i \rightarrow f} \equiv \tau_{i \rightarrow f}^{-1}$):

$$w_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |\langle \psi^f | W_\lambda(\mathbf{q}) | \psi^i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega_{\mathbf{q}}), \quad (3.5)$$

gdzie \mathbf{q} jest wektorem falowym fononu, $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ energią fononu, $E_f(E_i)$ energią stanu końcowego (początkowego), λ indeksem polaryzacji. Operator $W_\lambda(\mathbf{q})$ opisujący oddziaływanie ma następującą postać:

$$W_\lambda(\mathbf{q}) = \Lambda_\lambda(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}, \quad (3.6)$$

gdzie Λ jest elementem macierzy rozpraszania:

$$|\Lambda(q)|^2 = \frac{\hbar}{2\rho cV|q|} (D^2|\mathbf{q}|^2 + P). \quad (3.7)$$

Układ będący tematem rozprawy posiada symetrię cylindryczną. W związku z tym dokonano przejścia z kartezjańskiego układu współrzędnych na cylindryczny. Szybkość relaksacji przyjmuje wówczas następującą postać:

$$\begin{aligned}
w_{n'l' \rightarrow nl} &= \frac{1}{4\pi^2 \hbar \rho c^2} q_0^3 (D^2 q_0^2 + P) \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta \\
&\times \left\{ \left| \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\phi' e^{i(l-l')\phi'} e^{iq_0 r \sin \theta \cos(\phi-\phi')} r R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \right|^2 \right. \\
&\times \left. \left| \frac{2}{d} \int_{-d/2}^{d/2} \cos^2 \left(\pi \frac{z}{d} \right) e^{-iz q_0 \cos \theta} dz \right|^2 \right\}, \tag{3.8}
\end{aligned}$$

gdzie $q_0 = (E_{n'l'} - E_{nl})/\hbar c$ a $R_{nl}(r)$ jest częścią radialną funkcji $\psi_{||}(r)$ w płaszczyźnie. Całkę po ϕ' można zastąpić funkcją Bessela. Całka po zmiennej z wyraża się za pomocą funkcji $f\left(\frac{1}{2}d q_0 \cos \theta\right)$ gdzie:

$$f(x) \equiv \frac{\pi^2}{\pi^2 x - x^3} \sin x. \tag{3.9}$$

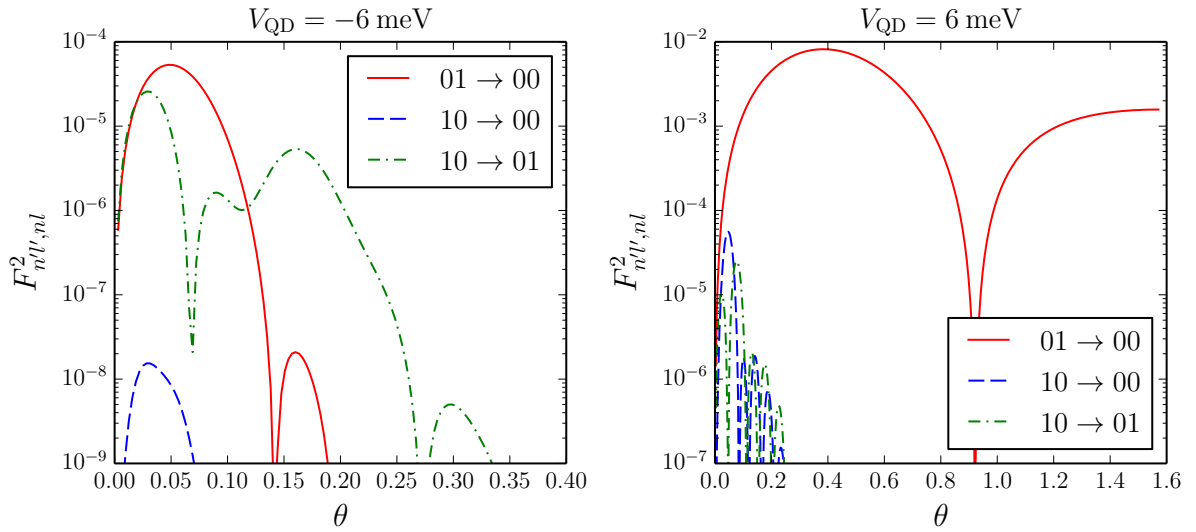
Po zastosowaniu powyższych operacji i podstawień, wzór opisujący szybkość relaksacji orbitalnej przyjmuje następującą postać:

$$w_{n'l' \rightarrow nl} = \frac{2\pi}{\hbar \rho c^2} q_0^3 (D^2 q_0^2 + P) \int_0^{\pi/2} d\theta \sin \theta F_{n'l',nl}^2(\theta), \tag{3.10}$$

gdzie:

$$F_{n'l',nl}(\theta) = f\left(\frac{1}{2}d q_0 \cos \theta\right) \int_0^\infty dr J_{|l-l'|}(q_0 r \sin \theta) r R_{nl}(r) R_{n'l'}(r). \tag{3.11}$$

Dla stanów zbliżonych energetycznie, czyli takich, gdzie różnica wynosi dziesiąte części meV, fonony emitowane są we wszystkich kierunkach czyli zarówno w płaszczyźnie jak i prostopadle do niej (prawy panel rysunku 3.4). Są zatem niezależne od grubości próbki. Dla stanów oddalonych o kilka meV fonony rozchodzą się prostopadle i są silnie skorelowane z grubością (lewy panel rysunku 3.4).

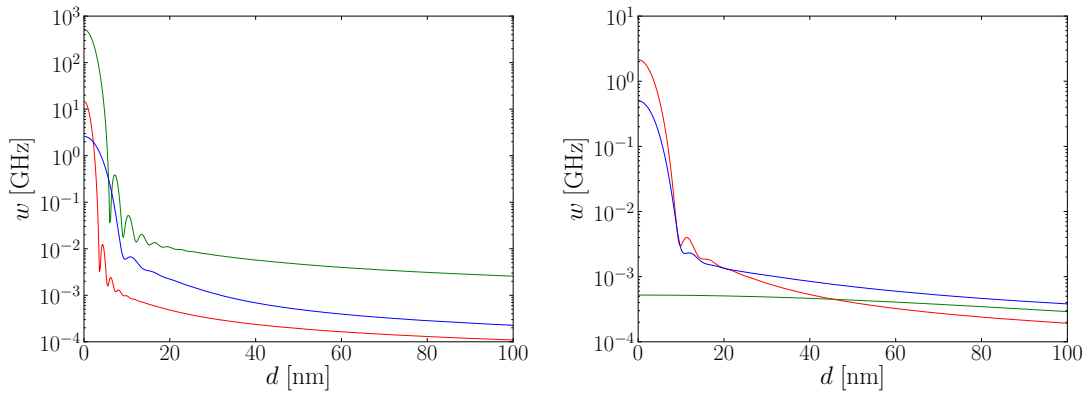


RYSUNEK 3.4: Wykres przedstawiający zależność emisji fotonów od kąta dla dwóch potencjałów V_{QD} [61]. Po lewej (prawej) stan podstawowy i pierwszy wzbudzony znajdują się w kropce (pierścieniu).

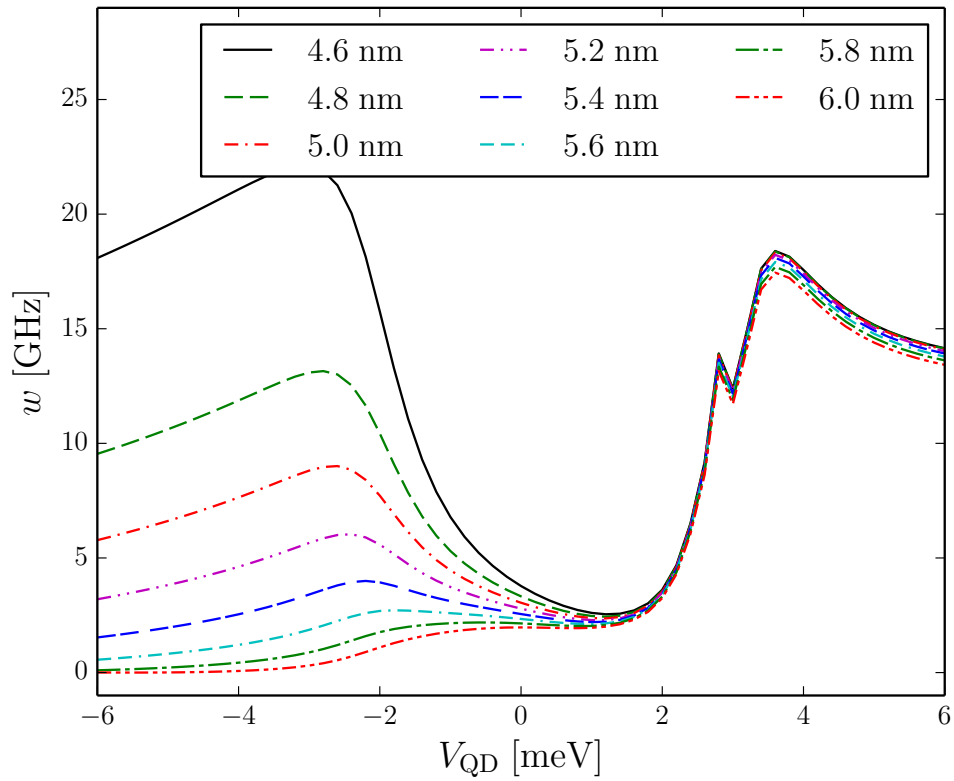
Pomijając czynniki związane z wpływem materiału z jakiego wykonano układ na szybkość relaksacji składa się wiele czynników związanych z wzajemnym ułożeniem funkcji falowych, różnicą pomiędzy stanami energetycznymi, a także grubością układu, które zostaną omówione w kolejnych podrozdziałach.

3.2.1 Wpływ grubości układu na szybkość relaksacji

Grubość próbki wpływa w sposób znaczący na relaksację. Zmiany te mają charakter oscylacyjny. Im grubsza próbka tym relaksacja zachodzi wolniej. Ma to związek z długością fononu odpowiedzialnego za proces. Gdy jego długość jest porównywalna z długością próbki, relaksacja zachodzi szybciej. Dla stanów znajdujących się w kropce kwantowej (lewy panel rysunku 3.5), a zatem w sytuacji gdy V_{QD} ma ujemne wartości, długość fononu związanego z przejściem ze stanu 01 do 00 (kilka meV) jest rzędu kilku nanometrów, stąd wysoka wartość dla próbek o grubości 5 - 10 nm i silna zależność od grubości. Stany znajdujące się w pierścieniu (prawy panel rysunku 3.5) są zbliżone energetycznie (różnice to dziesiąte części meV) stąd długość fononu odpowiedzialnego za relaksację jest znacznie większa od rozmiarów próbki i nie zależy znacząco od grubości.



RYSUNEK 3.5: Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji od grubości próbki dla $V_{\text{QD}} = -6$ meV (lewa strona) i $V_{\text{QD}} = 6$ meV (prawa strona). Widoczne są oscylacje związane z różnicą energetyczną pomiędzy stanami. Czerwony kolor odpowiada za relaksację $01 \rightarrow 00$, niebieski $10 \rightarrow 00$ zaś zielony za relaksację pośrednią pomiędzy 01 i 10 .



RYSUNEK 3.6: Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji ze stanu 01 do stanu 00 od grubości próbki dla różnych V_{QD} [61]. Dla grubości między 4.8 nm a 5.4 nm jest w całym zakresie rzędu GHz.

3.2.2 Wpływ potencjału kropki na szybkość relaksacji

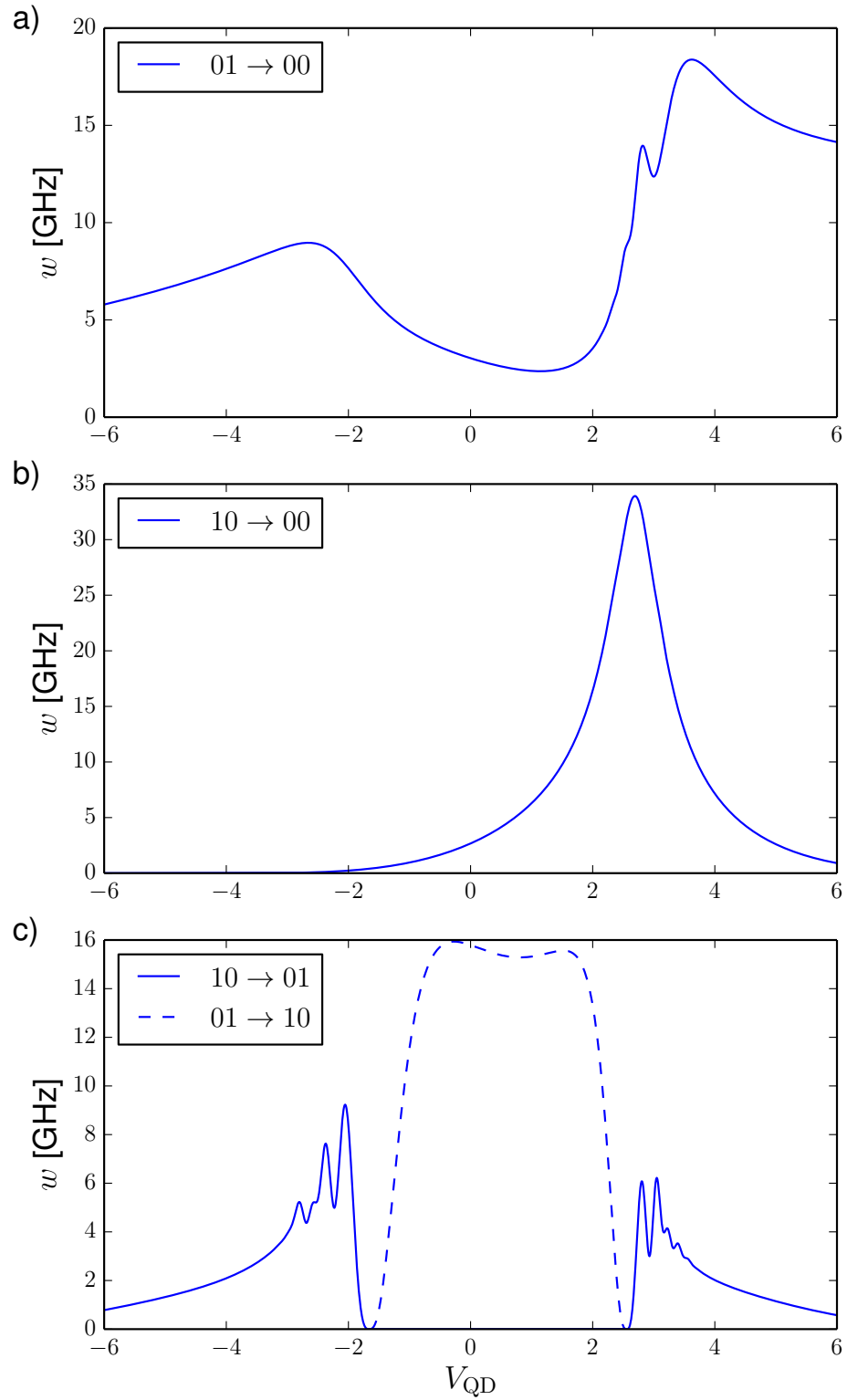
Podobnie jak w przypadku relaksacji orbitalnej kluczowe jest wzajemne przykrywanie się funkcji falowych oraz różnica energetyczna pomiędzy uwzględnianymi stanami. Dla skrajnych (ujemnych i dodatnich) wartości V_{QD} przykrywanie się stanów podstawowego i pierwszego wzbudzonego jest wysokie [panel a) rysunku 3.7]. Stany w pierścieniu mają nieznacznie większe przykrywanie od stanów osadzonych w kropce. Najmniejsze przykrywanie stanów 00 i 01 następuje dla V_{QD} wynoszącego 1 meV i wtedy stany są odseparowane. Wówczas dla próbki o grubości 5nm szybkość relaksacji jest najniższa (rysunek 3.6). W odróżnieniu od relaksacji spinowej, zgodnie ze wzorem złotej reguły Fermiego, im większa różnica energetyczna tym krótszy czas relaksacji [równanie (3.10)].

Specyficzny charakter wykresu relaksacji pośredniej [panel b) rysunku 3.7] ze stanu 01 do 10 (10 do 01) wynika z przecinania się linii widma energetycznego w obszarze V_{QD} od -2 do 2 meV. W miejscu przecięcia się stanów stają się one zdegenerowane i czas relaksacji dąży do nieskończoności.

Charakterystyczny pik na wykresie relaksacji ze stanu 10 do 00 [panel c) rysunku 3.7] wynika z nakrywania stanów. Oba stany zmieniają położenie w podobnym zakresie V_{QD} . Stan 00 przelewa się do części pierścieniowej, a stan 10 do kropkowej, w związku z tym w wymienionym zakresie V_{QD} ich nakrywanie się jest duże.

3.2.3 Wnioski

Specyficzna budowa układu DRN pozwala na manipulację funkcjami falowymi, co przekłada się na współczynnik ich nakrywania, który jest kluczowym parametrem wyznaczającym czas relaksacji. Przy manipulacji V_{QD} zarówno spinowa jak i orbitalna relaksacja może ulec zmianie nawet o kilka rzędów. Szybkość relaksacji w sytuacji, gdy stany są odseparowane, jest znacznie większa niż w przypadku kropek i pierścieni o podobnych wymiarach. Pozwala to na zastosowanie DRN w roli qubitów.

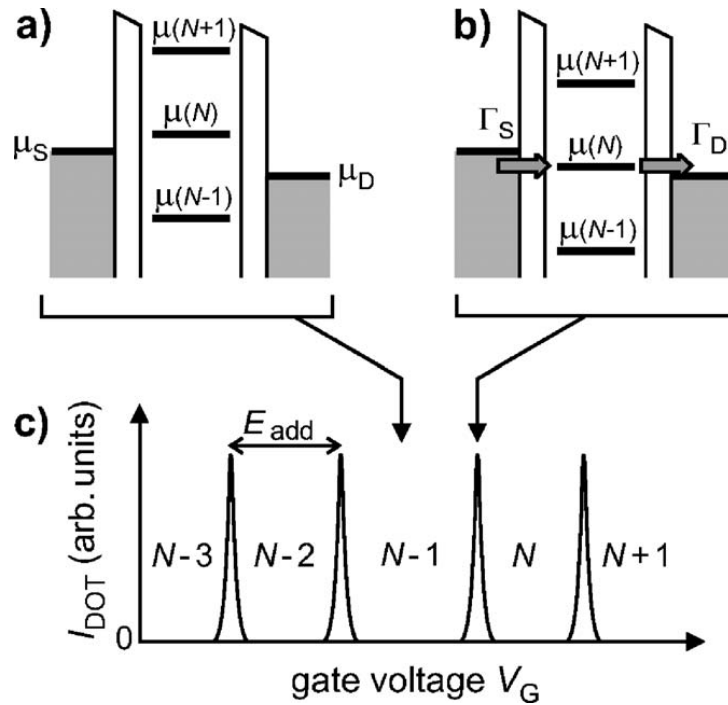


RYSUNEK 3.7: Wykres przedstawiający zależność szybkości relaksacji od V_{QD} [61] dla przejść a) $01 \rightarrow 00$, b) $10 \rightarrow 00$ c) relaksacji pośredniej pomiędzy stanami 01 i 10.

Rozdział 4

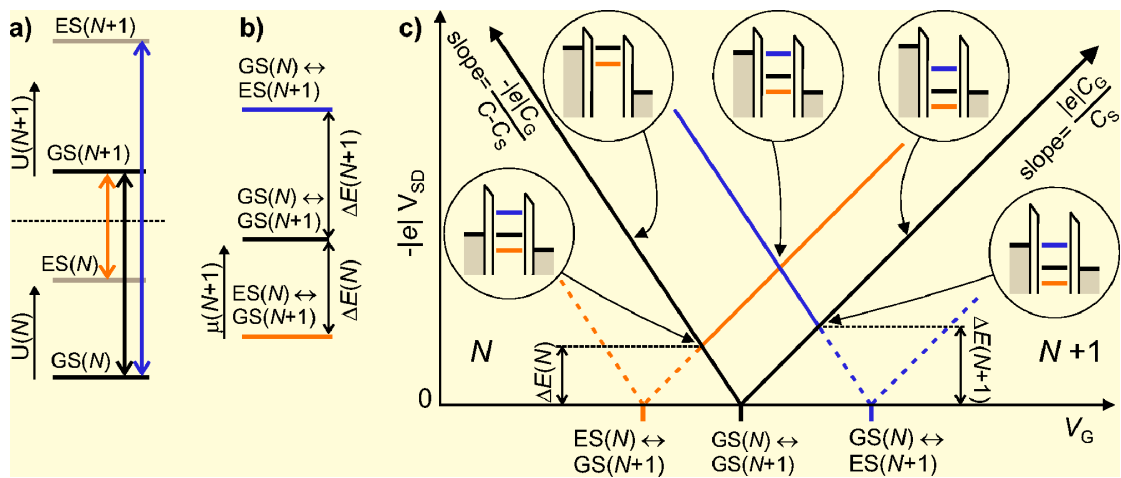
Transport ładunku

Transport elektronu przez nanoukłady jest tematem zainteresowania wielu grup badawczych [17, 41, 70, 82, 86–91]. Przepływ ładunku przez nanoukład jest możliwy, gdy istnieje chociaż jeden poziom energetyczny między potencjałem źródła a drenu, w tzw. *bias window* $\mu_S - \mu_D = -|e|V_{SD}$. W przeciwnym razie liczba elektronów w układzie pozostaje stała [17].



RYSUNEK 4.1: Schemat poziomów oraz wykres zależności prądu od napięcia na bramce [17]. Strzałki pokazują związek pomiędzy obecnością (b) i brakiem (a) stanu w *biaswindow*, a prądem przepływającym przez układ.

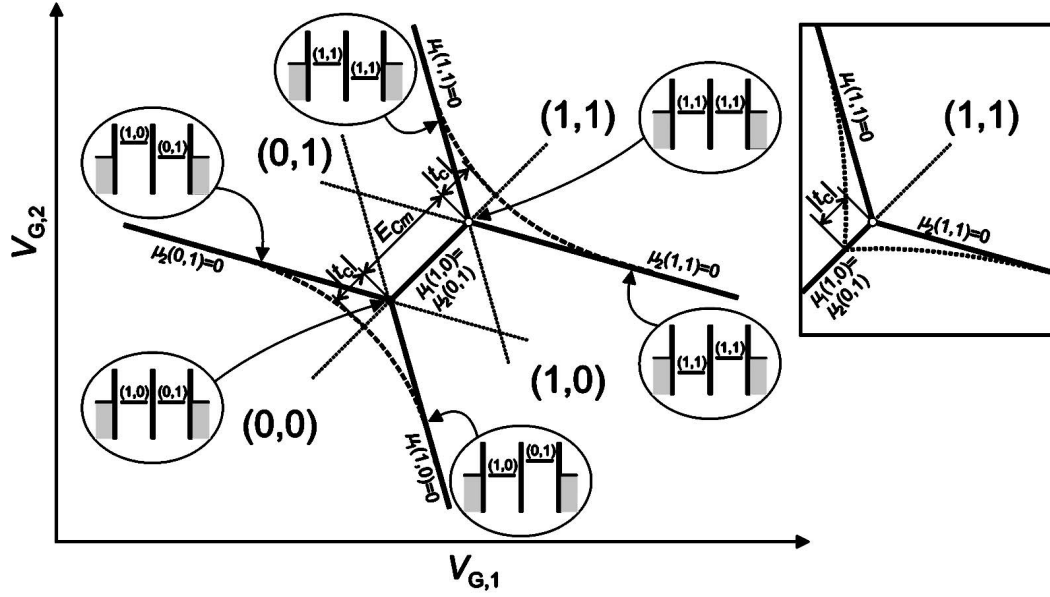
Na rysunku 4.1 przedstawiony został wykres zależności prądu płynącego przez kropkę kwantową (podobne zachowanie występuje dla pierścieni i DRN, zatem zasada zostanie wyjaśniona w oparciu o kropki kwantowe) od napięcia na bramce. Przyjmuje on formę charakterystycznych pików w stałej odległości równej E_{ad} . Pik osiąga swoje maksimum dla sytuacji nakreślonej na panelu b) rysunku 4.1, gdzie stan o potencjale chemicznym $\mu(N)$ mieści się pomiędzy potencjałem źródła i drenu. Przepływ ładunku spada do zera w sytuacji przedstawionej na panelu a), gdy stan o potencjale chemicznym $\mu(N-1)$ jest poniżej potencjału drenu, natomiast o potencjale $\mu(N)$ powyżej potencjału źródła.



RYSUNEK 4.2: Schemat wysokiego bias window [17]. Panele a) i b) zawierają wszystkie możliwe przejścia wraz z przypisanymi im kolorami oraz odpowiadającymi różnicami energetycznymi. Panel c) zawiera diagram z liniami reprezentującymi (odpowiednio dla danych przejść przy zachowaniu spójności kolorystycznej) sytuację gdy potencjał chemiczny przejścia jest równy potencjałowi źródła bądź drenu oraz schematy przedstawiające schematy bias window.

Dla odpowiednio dużej różnicy potencjałów należy uwzględnić także wkład stanów wzbudzonych. Drabinka stanów z rysunku 4.2 uwzględnia większą ilość stanów biorących udział w transporcie. Przy zmianach różnicy potencjału źródła i drenu oraz napięcia na bramce schemat przyjmuje charakterystyczny kształt litery "V", gdzie przepływ jest możliwy wewnątrz i na ramionach wykresu, a jest zabroniony poza nimi. Przewodnictwo różniczkowe przyjmuje wartość niezerową tylko na granicy obszaru (linia ciągła i przerywana).

W przypadku układu dwóch (i więcej) kropek przy niewielkiej różnicy potencjałów transport jest możliwy tylko w punktach potrójnych (dla większych różnic



RYSUNEK 4.3: Potencjał elektrochemiczny układu i odpowiadające mu stany w zależności od napięcia na bramkach [17]. Linie na diagramie odpowiadają sytuacjom gdy potencjały elektrochemiczne kropek są równe potencjałom elektrochemicznym elektrod, co obrazują miniatury ze schematami *bias window*. Na panelu po prawej stronie jest powiększenie fragmentu diagramu.

potencjałów źródło-dren są to większe obszary) zaznaczonych na rysunku 4.3, czyli wtedy gdy jest spełniony warunek: $\mu_{\text{source}} \geq \mu_1(N, M) \geq \mu_2(N, M) \geq \mu_{\text{drain}}$, gdzie N i M to liczby elektronów w pierwszej i drugiej kropce.

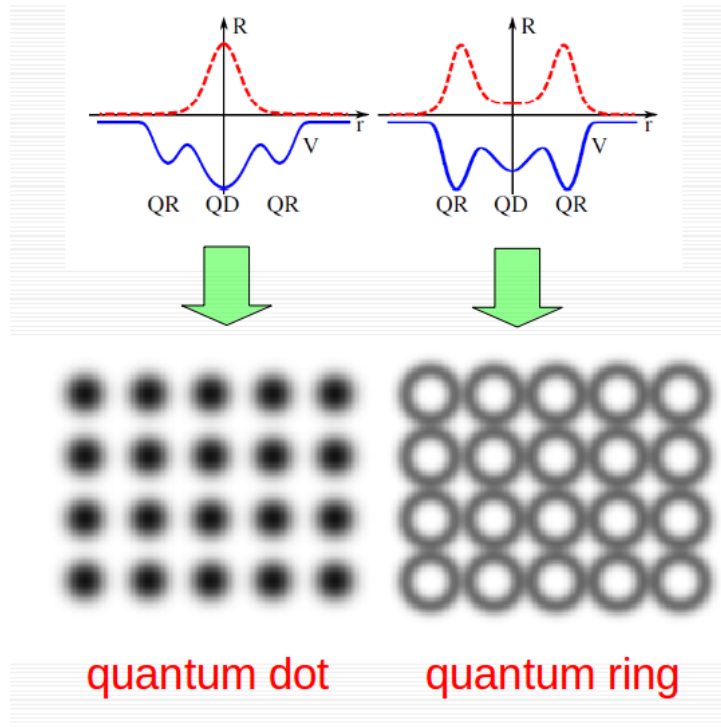
W zależności od stałej tunelowania t_c elektrony mogą być zlokalizowane, bądź okupować orbitale wiążący ψ_B i antywiążący ψ_A będące superpozycją stanów jednokropkowych ϕ_1 i ϕ_2 . Dla równych potencjałów chemicznych kropek orbital wiążący ma energię obniżoną o $|t_c|$ a antywiążący zwiększoną o tę samą wartość. Tym samym odległość punktów potrójnych wzrasta o dwukrotność tej wartości.

Przepływ przez układ dwóch [92–94] (bądź więcej [95–99]) kropek oraz pierścieni [99] został dokładnie omówiony. Transport przez układ wielu DRN-ów (rysunek 4.4) można opisać za pomocą Hamiltonianu Andersona [100]

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (t_{ij} - \epsilon_{\text{QR}} \delta_{ij}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \epsilon_{\text{QD}} \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + V \sum_{i\sigma} (f_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \text{H.c.}) \quad (4.1)$$

$$+ \frac{U_{\text{QD}}}{2} \sum_i n_i(n_i - 1),$$

gdzie n_i jest liczbą elektronów w węźle, t_{ij} jest energią przeskoku do sąsiednich pierścieni, U_{QD} opisuje oddziaływanie elektronów w tej samej kropce, $c_{i\sigma}^\dagger$ oraz $c_{i\sigma}$ ($f_{i\sigma}^\dagger$ oraz $f_{i\sigma}$) są odpowiednio operatorami kreacji i anihilacji elektronu w i -tym pierścieniu (kropce) zaś ϵ_{QR} (ϵ_{QD}) energią elektronu. V odpowiada za hybrydyzację pomiędzy stanami w kropce i pierścieniu kwantowym na tym samym węźle.



RYSUNEK 4.4: Układ wielu DRN z elektronem w części kropkowej (po lewej) będący izolatorem i pierścieniowej (po prawej) o charakterystyce przewodnika [46]. U góry odpowiadające sytuacji uproszczone wykresy potencjału definiującego oraz funkcji falowej.

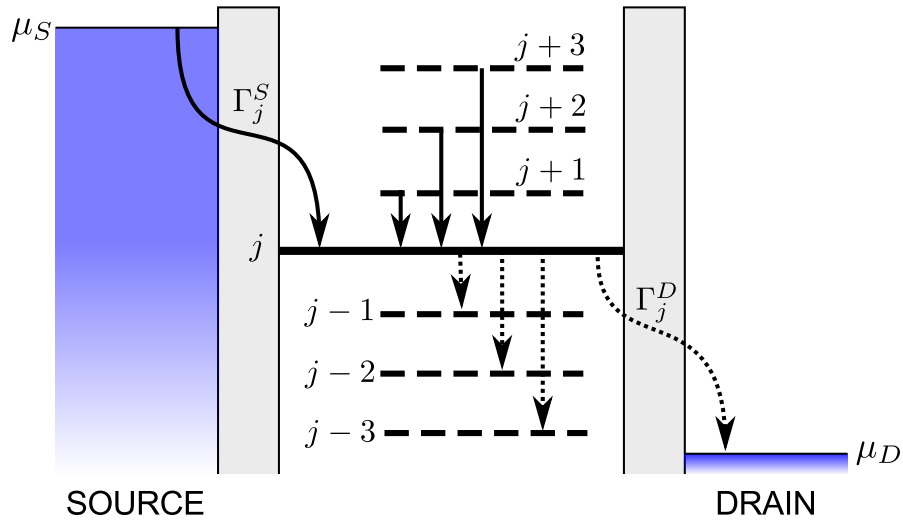
Transport przez strukturę jest uzależniony od prawdopodobieństwa tunelowania elektronu przez układ. Dla DRN jest on ściśle związany z potencjałem kropki kwantowej. Stany znajdujące się w kropce są słabo sprzężone z elektrodami, te, znajdujące się w pierścieniu, silniej. Układ w którym funkcja falowa jest zlokalizowana głównie w pierścieniu (kropce) zachowuje się jak przewodnik (izolator).

4.1 Równania ruchu

Tunelowanie elektronu z jednej strony jest ograniczone przez sprzężenie z elektrodami, z drugiej zaś, przez obsadzenie stanów w układzie i elektrodach [101]. Przyjmuje się, że elektrody posiadają ciągłe widmo, zaś widmo układu jest skwantowane. Przy założeniu zerowej temperatury ewolucja w czasie obsadzenia stanu j wyraża się wzorem:

$$\dot{\rho}_j = \Gamma_j^S \left(1 - \sum_{i=0}^{n_0-1} d_i \rho_i \right) + \sum_{i=j+1}^{n_0-1} d_i w_{i \rightarrow j} \rho_i - \left(\Gamma_j^D + \sum_{i=0}^{j-1} d_i w_{j \rightarrow i} \right) \rho_j, \quad (4.2)$$

gdzie n_0 to liczba stanów w *biaswindow*, Γ_S^j i Γ_D^j to częstości tunelowania elektronu z i do drenu, ρ_j obsadzeniem stanu j , d_i jest degeneracją stanu i , a $w_{j \rightarrow i}$ częstością tunelowania ze stanu j do stanu i .



RYSUNEK 4.5: Schematyczny zapis procesów wpływających na obsadzenie stanu j (ρ_j) [61]. Po lewej i prawej stronie na niebiesko zaznaczono elektrody wraz z ich potencjałami elektrochemicznymi. Ciągła gruba pozioma linia oznacza potencjał stanu j . Przerywane poziome linie opowiadają wyższym i niższym stanom znajdującym się pomiędzy potencjałem źródła i drenu. Pionowe strzałki odpowiadają procesom relaksacji zwiększającym (linia ciągła) bądź zmniejszającym (linie kropkowane) ρ_j . Strzałki prowadzące od i do elektrod symbolizują tunelowanie elektronu.

Elektron może obsadzić stan j tunelując do niego ze źródła - wyraz proporcjonalny do Γ_S^j o ile układ nie jest w pełni obsadzony, bądź relaksując z wyższych

stanów energetycznych - drugi wyraz równania (4.2). Zwolnienie poziomu następuje, gdy elektron przetuneluje do drenu (Γ_D^j) bądź zrelaksuje do któregoś z niższych energetycznie stanów - ostatni człon równania (4.2). Schematyczny zapis powyższych procesów znajduje się na rysunku 4.5.

Powyższe równania można zastosować z drobnymi modyfikacjami dla układów o skończonej temperaturze lub w obecności pola magnetycznego, wówczas równania na obsadzenie stanu przyjmują postać:

$$[f_S^i \Gamma_S^i + f_D^i \Gamma_D^i](1 - \sum_j \rho_j) - [f_S^i \Gamma_S^i + (1 - f_D^i) \Gamma_D^i] \rho_i + W(i) = 0, \quad (4.3)$$

gdzie i oznacza liczby kwantowe $nl \uparrow \downarrow$, f_S^i (f_D^i) są funkcjami rozkładu Fermiego-Diraca dla elektrod, a $W(i)$ członem odpowiadającym za relaksację spinową i orbitalną. Jeśli nie zaznaczono inaczej, przyjmujemy, że temperatura jest na tyle niska, że można zaniedbać rozmycie poziomów, zaś pole magnetyczne jest równe 0 T.

Dla stanów stacjonarnych układ równań można zapisać w formie macierzowej:

$$\begin{pmatrix} \Gamma_0^S + \frac{1}{d_0} \Gamma_0^D & \Gamma_0^S - w_{1 \rightarrow 0} & \Gamma_0^S - w_{2 \rightarrow 0} & \dots \\ \Gamma_1^S & \Gamma_1^S + \frac{1}{d_1} (\Gamma_1^D + w_{1 \rightarrow 0}) & \Gamma_1^S - w_{2 \rightarrow 1} & \dots \\ \Gamma_2^S & \Gamma_2^S & \Gamma_2^S + \frac{1}{d_2} (\Gamma_2^D + w_{2 \rightarrow 0} + w_{2 \rightarrow 1}) & \dots \\ \Gamma_3^S & \Gamma_3^S & \Gamma_3^S & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Gamma_{n_0-1}^S & \Gamma_{n_0-1}^S & \Gamma_{n_0-1}^S & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dots \\ \Gamma_0^S - w_{(n_0-1) \rightarrow 0} \\ \Gamma_1^S - w_{(n_0-1) \rightarrow 0} \\ \Gamma_2^S - w_{(n_0-1) \rightarrow 0} \\ \Gamma_3^S - w_{(n_0-1) \rightarrow 0} \\ \dots \\ \Gamma_{n_0-1}^S + \frac{1}{d_{n_0-1}} \left(\Gamma_{n_0-1}^D + \sum_{i=0}^{n_0-2} w_{(n_0-1) \rightarrow i} \right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\rho}_0 \\ \bar{\rho}_1 \\ \bar{\rho}_2 \\ \bar{\rho}_3 \\ \dots \\ \bar{\rho}_{n_0-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Gamma_0^S \\ \Gamma_1^S \\ \Gamma_2^S \\ \Gamma_3^S \\ \dots \\ \Gamma_{n_0-1}^S \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Rozwiązaniem są obsadzenia wszystkich stanów w *bias window*, które następnie umieszczamy we wzorze na całkowity prąd, będący sumą prądów przez pojedyncze stany:

$$I = \sum_{i=0}^{n_0-1} I_i^{\text{in}} = \sum_{i=0}^{n_0-1} I_i^{\text{out}}, \quad (4.5)$$

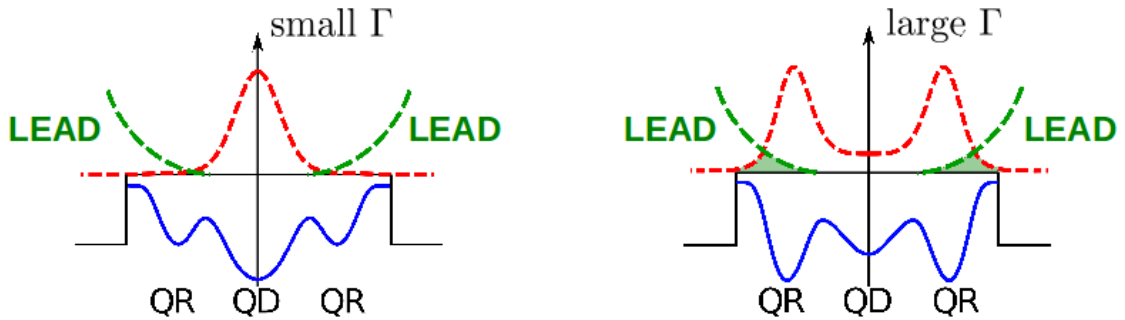
gdzie:

$$I_i^{\text{in}} = e\Gamma_i^S(1 - \rho_i), \quad I_i^{\text{out}} = e\Gamma_i^D \rho_i, \quad (4.6)$$

oznaczają prąd wpływający na poziom i (I_i^{in}) oraz wypływający z poziomu i (I_i^{out}).

4.1.1 Metoda Bardeena

Częstość tunelowania Γ elektronu zależy od nakrywania się funkcji falowych układu z elektrodami, na którego wielkość wpływają geometria układu i elektrod oraz wzajemna ich odległość [102, 103]. Częstość tunelowania w tym przybliżeniu jest ściśle zależna od nakrywania się funkcji falowych układu i elektrody. Co przedstawiono schematycznie na rysunku 4.6 (dokładna zależność częstości tunelowania od V_{QD} znajduje się na rysunku 4.8). Stany znajdujące się w kropce są gorzej sprzężone od stanów znajdujących się w pierścieniu.

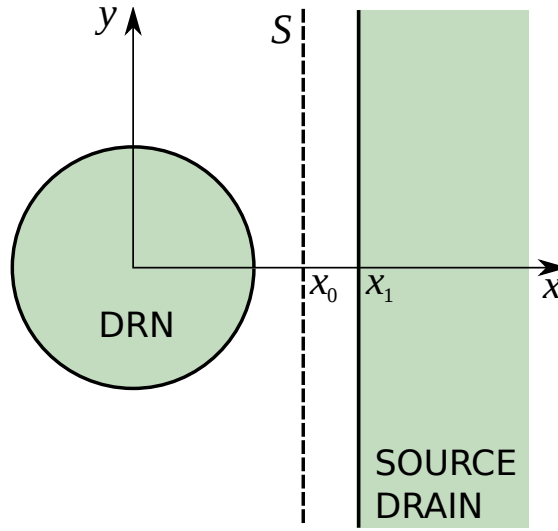


RYСУNEK 4.6: Schematyczne przedstawienie zależności częstości tunelowania od potencjału definiującego strukturę [61]. Po lewej (prawej) układ słabo (silnie) sprzężony z elektrodami. Zielone pole pokazuje obszar przykrywania funkcji falowych tzw. overlap factor.

Przybliżenie Bardeena [102, 104–107] pozwala oszacować Γ przy następujących założeniach:

1. sprzężenie układu i elektrod jest na tyle niskie, że można rozwiązać równania Schrödingera oddzielnie dla nanoukładu i elektrod,
2. funkcje podukładów są ortogonalne.

Na rysunku 4.7 przedstawiono geometrię układu spełniającego powyższe założenia. DRN został połączony szeregowo z elektrodami znajdującymi się w odległości x_1 , powierzchnia wzdłuż której liczona jest całka znajduje się w odległości x_0 od środka układu współrzędnych.



RYSUNEK 4.7: Geometria układu DRN i elektrody wykorzystana do obliczeń częstotliwości tunelowania [61].

Opierając się na tym założeniu częstość tunelowania można wyliczyć korzystając z poniższej formuły:

$$\Gamma(\epsilon) = 2\pi \sum_{\mathbf{k}} |t_{\mathbf{k}}|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_{\mathbf{k}}). \quad (4.7)$$

Elementy macierzy tunelowania $t_{\mathbf{k}}$ mogą zostać obliczone jako:

$$t_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar}{2m^*} \int_S d\vec{S} \cdot (\psi_{\mathbf{k}}^* \vec{\nabla} \Psi_{nl} - \Psi_{nl} \vec{\nabla} \psi_{\mathbf{k}}^*), \quad (4.8)$$

gdzie S jest powierzchnią, zaznaczoną przerywaną linią na rysunku 4.7, po której następuje całkowanie, Ψ_{nl} są funkcjami falowymi DRN, a $\psi_{\mathbf{k}}$ elektrody. Przyjmują

one postać:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{\sqrt{2}}{L} e^{ik_y y} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\kappa(x-x_1)}, \quad (4.9)$$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + U - \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m^*}, \quad (4.10)$$

gdzie:

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m^* \left(U - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right)}, \quad (4.11)$$

$$\sin \theta = \frac{2\kappa k_x}{\kappa^2 + k_x^2}. \quad (4.12)$$

Funkcje falowe DRN mają postać:

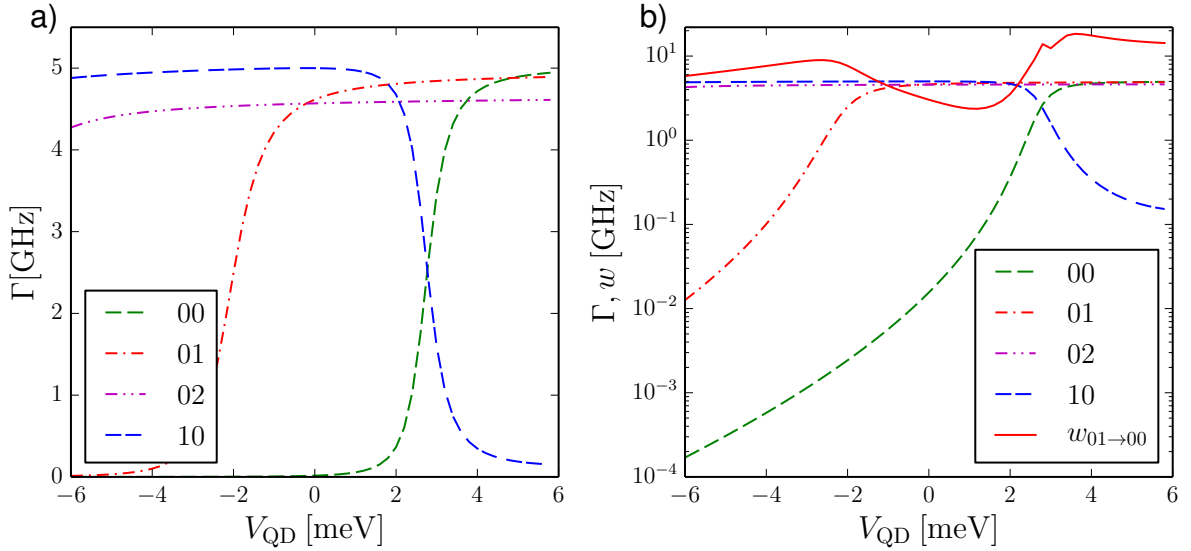
$$\Psi_{nl} = R_{nl}(r) e^{il\phi} = R_{nl}(\sqrt{x^2 + y^2}) e^{il \arctg \frac{y}{x}}. \quad (4.13)$$

Podstawiając funkcje falowe do równania 4.8 i przechodząc do biegunowego układu współrzędnych (r i ϕ) otrzymujemy wzór na $t_{\mathbf{k}}$ następującej postaci:

$$\begin{aligned} t_{\mathbf{k}} = & \frac{\sqrt{2}\hbar x_0}{2m^* L} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{\kappa(x_0-x_1)} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \frac{e^{i(k_y x_0 \tan \phi + l\phi)}}{\cos^2 \phi}, \\ & \times \left[R'_{nl} \left(\frac{x_0}{\cos \phi} \right) \cos \phi + R_{nl} \left(\frac{x_0}{\cos \phi} \right) \left(\frac{il \sin 2\phi}{2x_0} - \kappa \right) \right], \end{aligned} \quad (4.14)$$

gdzie R'_{nl} jest pochodną funkcji falowej DRN.

Odległość elektrody x_1 od układu determinuje Γ , im większa tym częstość jest niższa. Jednak stosunek częstości tunelowania różnych stanów jest niezależny od odległości elektrody, a zależy jedynie od geometrii układu [87, 108]. Metodę Bardeena zastosowano również do stanów wieloelektronowych [109].



RYSUNEK 4.8: Częstotliwość tunelowania jako funkcja V_{QD} [61]. Po prawej stronie te same częstotliwości w skali logarytmicznej z szybkością relaksacji jako odnośnikiem.

4.1.2 Porównanie wyników z pakietem Kwant

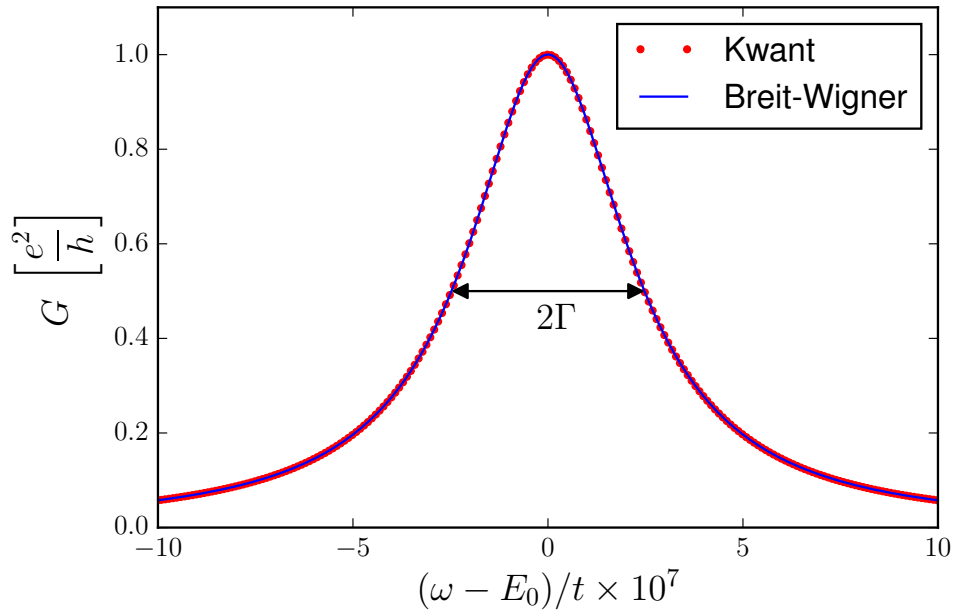
Pakiet Kwant wylicza przewodnictwo dla wybranego nanoukładu. Przy zastosowaniu wzoru Brighta-Wignera [110–112] istnieje możliwość wyliczenia częstotliwości tunelowania poprzez wyznaczenie szerokości połówkowej piku przewodnictwa.

$$G(\omega) = \frac{e^2}{h} \frac{\Gamma^2}{(\omega - E_0)^2 + \Gamma^2}, \quad (4.15)$$

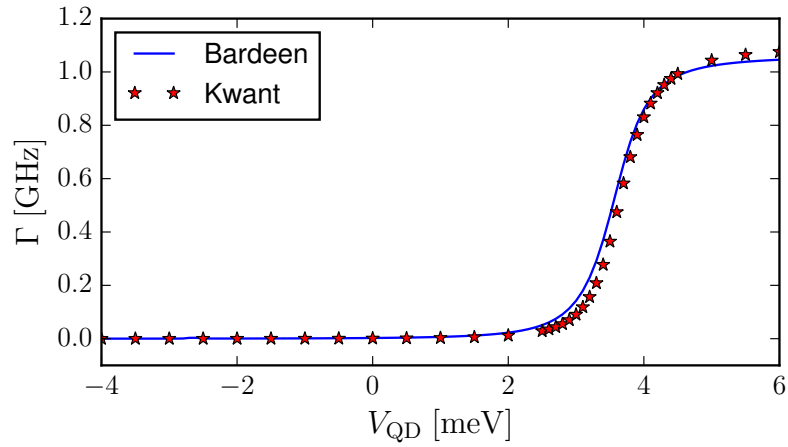
gdzie G jest przewodnictwem układu, E_0 energią stanu, a Γ częstotliwością tunelowania. Na rysunku 4.9 znajduje się przewodnictwo wyliczone za pomocą pakietu Kwant oraz otrzymane w oparciu o formułę ze wzoru (4.15) dla $V_{QD} = 1$ meV.

Powyższy wzór działa dla układów słabo sprzężonych z elektrodami. W tym zakresie otrzymujemy dużą zgodność z wynikami otrzymanymi dzięki przybliżeniu Bardeena co przedstawiono na rysunku 4.10.

W związku z tym, że pakiet Kwant nie uwzględnia relaksacji pomiędzy stanami (ani spinowej ani orbitalnej) w obliczeniach posłużono się częstotliwościami otrzymanymi przy zastosowaniu podejścia Bardeena.



RYSUNEK 4.9: Pik przewodnictwa dla $V_{\text{QD}} = 1$ meV [63]. Szerokość połówkowa pikku przewodnictwa odpowiada dwukrotności częstotliwości tunelowania.

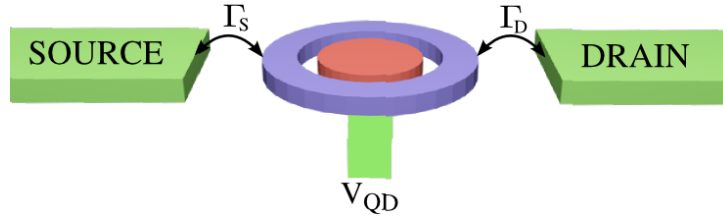


RYSUNEK 4.10: Porównanie częstości tunelowania otrzymanej przy zastosowaniu podejścia Bardeena (niebieska ciągła linia) i pakietu Kwant (gwiazdki)[63].

4.2 Symetryczne bariery

Specyficzna budowa DRN umożliwia - poprzez zmianę napięcia na bramce V_{QD} - manipulowanie kształtem funkcji falowej, który z kolei wpływa na sprzężenie z elektrodami.

Ogólna idea zostanie przedstawiona przy założeniu, że tylko jeden stan bierze



RYSUNEK 4.11: Schematyczny zapis procesów transportu jednoelektronowego [61]. Na zielono zaznaczono elektrody oraz bramkę, niebieskim i czerwonym DRN. Elektron tuneluje ze źródła do układu z częstością Γ_S skąd tuneluje do drenu z częstością Γ_D . Parametry układu są modyfikowane przez potencjał na bramce.

udział w transporcie. Uproszczony schemat układu został przedstawiony na rysunku 4.11. Elektron tuneluje ze źródła do układu, gdzie tylko stan podstawowy może zostać obsadzony, a następnie do drenu. Zmianę obsadzenia stanu opisuje poniższe równanie:

$$\Gamma_S(1 - \rho_0) - \Gamma_D\rho_0 = 0, \quad (4.16)$$

którego rozwiązaniem jest:

$$\rho_0 = \frac{\Gamma_S}{\Gamma_S + \Gamma_D}. \quad (4.17)$$

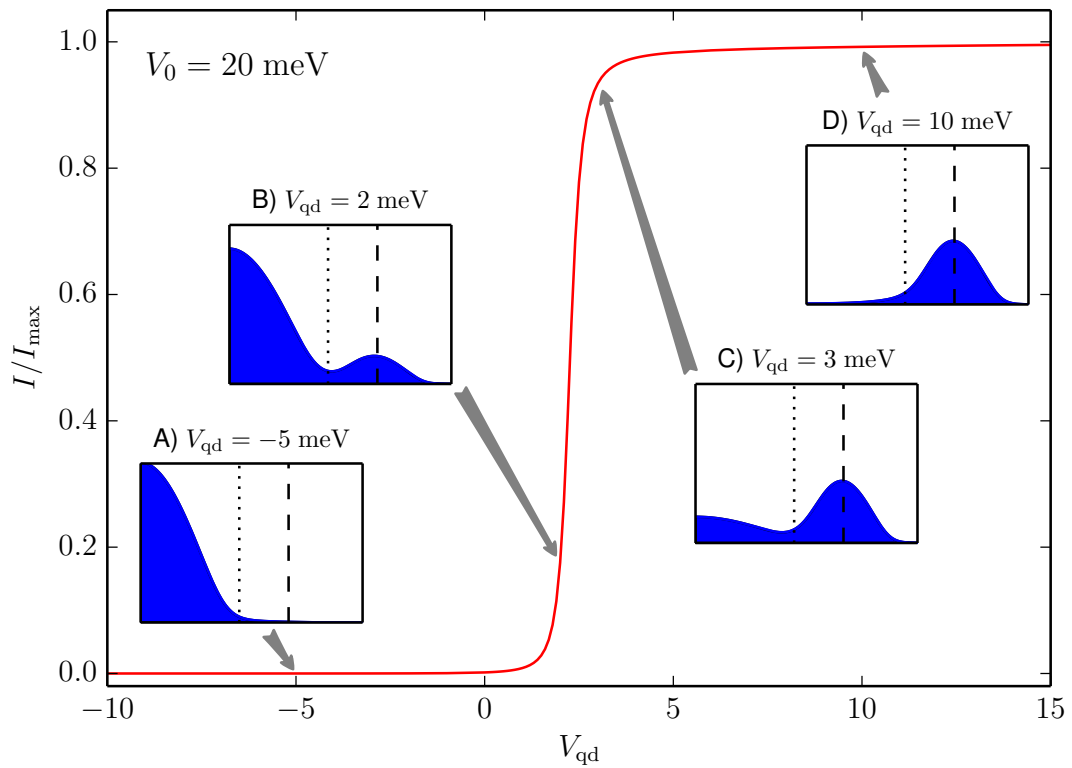
Wzór wyrażający wartość natężenia prądu w takiej sytuacji wygląda następująco:

$$I = e \frac{\Gamma_S \Gamma_D}{\Gamma_S + \Gamma_D}, \quad (4.18)$$

gdzie Γ_S (Γ_D) jest częstością tunelowania elektronu ze źródła do DRN (z DRN do drenu). Dla symetrycznych barier ($\Gamma_S = \Gamma_D = \Gamma$) wzór przyjmuje postać:

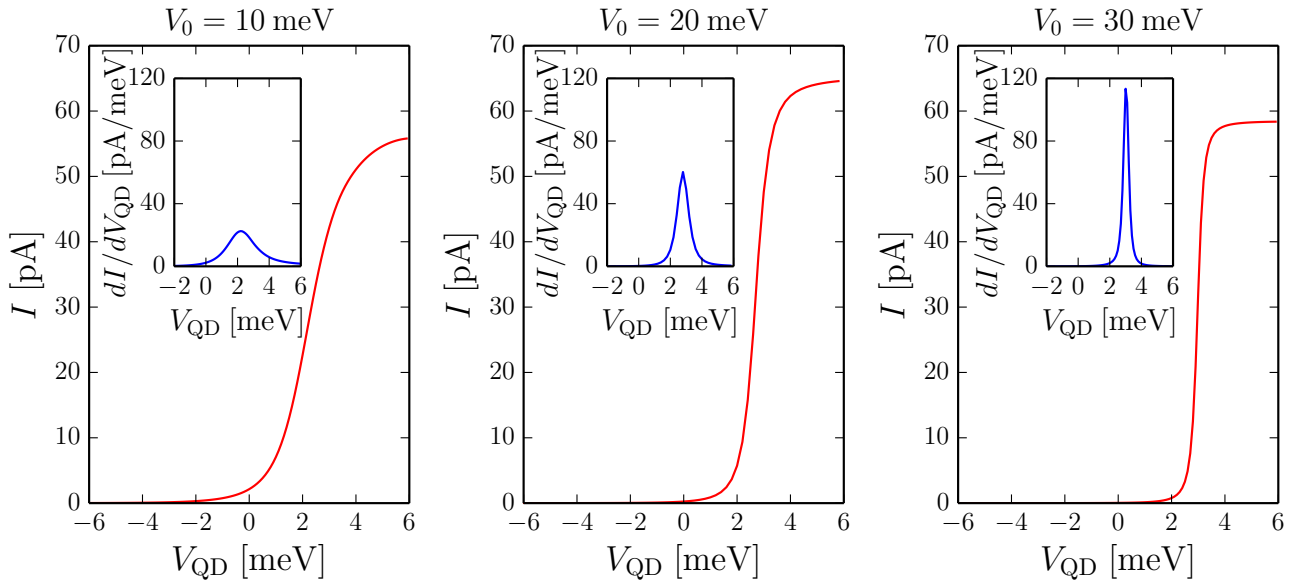
$$I = e \frac{\Gamma}{2}. \quad (4.19)$$

W tym przypadku prąd zależy liniowo od sprzężenia Γ . Dla ujemnych i bliskich zeru wartości V_{QD} funkcja falowa jest zlokalizowana w kropce kwantowej, w efekcie czego prąd przepływający przez strukturę jest niski. Zwiększenie potencjału V_{QD} do wartości dodatnich powoduje stopniowe "przelewanie się" funkcji falowej do pierścienia i wzrost częstości tunelowania, a zatem i natężenia prądu. Zależność ta została przedstawiona na 4.12; jej charakter jest uzależniony od wysokości bariery.



RYSUNEK 4.12: Prąd jako funkcja potencjału V_{QD} (czerwona linia) w jednostkach względnych [84]. Na panelach znajdują się funkcje falowe (niebieski obszar) dla poszczególnych punktów. Kropkowana (przerywana) linia pokazuje środek bariery (pierścienia). W miarę zwiększania V_{QD} funkcja falowa ulega przesunięciu z kropki do pierścienia czemu towarzyszy zwiększenie amplitudy prądu przepływającego przez DRN.

Tak zbudowany układ może pełnić funkcję tranzystora opartego na jednym elektronie (*single electron transistor*), który działa na innej zasadzie niż tradycyjny tranzystor [113–116]. Im wyższa bariera, tym bardziej stromy staje się wykres zależności amplitudy prądu od V_{QD} oraz wyższy pik przedstawiający pochodną natężenia prądu po zmianie napięcia na V_{QD} (rysunek 4.13). Dla odpowiednio wysokiej bariery, "przelanie się" funkcji następuje gwałtownie. Wzrasta też nieznacznie amplituda prądu. Zwiększanie wysokości bariery powoduje nieznaczne zmniejszenie rozmiarów efektywnych zarówno części kropkowej i pierścieniowej (studnia potencjału jest węższa i głębsza), a zatem i zwężenie funkcji falowej. Powoduje to również, że skupienie się funkcji falowej w jednej części (np. kropce) jest korzystniejsze energetycznie od rozmycia po całym układzie, gdy funkcja falowa znajduje się zarówno w kropce, jak i pierścieniu.

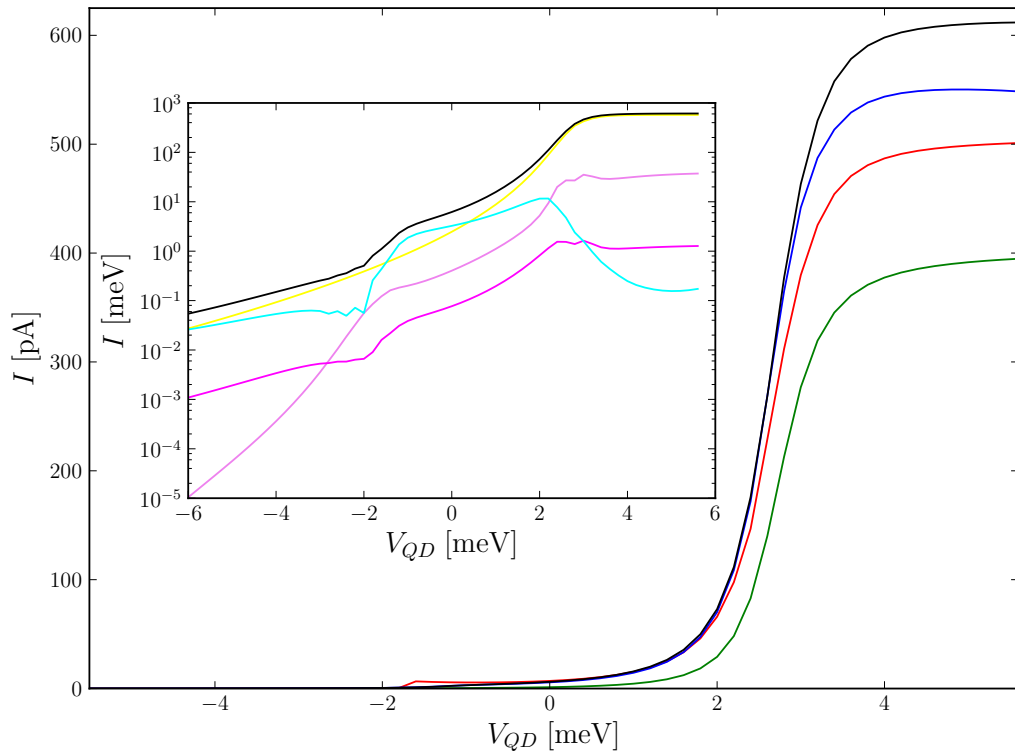


RYСУNEK 4.13: Charakterystyka prądowa DRN dla różnych wysokości bariery (10, 20, 30 meV) [61]. Czerwona linia to amplituda prądu płynącego przez układ, na panelach niebieską linią zaznaczono przewodnictwo różniczkowe. Im wyższa bariera tym bardziej stromy jest wykres i wyższy pik przewodnictwa różniczkowego.

Dla DRN o wysokości bariery $V_0 = 20$ meV stosunek prądu płynącego przez DRN dla stanu *on* (dla $V_{QD} = 4$ meV) do wartości w stanie *off* ($V_{QD} = -1$ meV) wynosi około 830. Przy przełączaniu w mniejszym zakresie zmian V_{QD} (z 1.5 meV na 3.5 meV) jest on rzędu 35. Dla porównania dla $V_0 = 30$ meV stosunek ten przy przełączaniu V_{QD} w tym samych zakresach wynosi odpowiednio 4600 i 250.

4.2.1 Zwiększanie liczby stanów

Z uwagi na niewielkie odległości pomiędzy stanami energetycznymi często konieczne jest uwzględnienie większej liczby stanów w obliczeniach, między innymi transportu ładunku. Każdy dodatkowy stan to dodatkowe równanie w układzie równań (4.4). Poniżej zamieszczono wyniki dla stopniowo zwiększającej się liczby stanów (1, 2, 3 i 4). Ogólna charakterystyka pozostaje niezmienna, zwiększa się tylko maksymalny prąd płynący przez strukturę. Ma to związek z szybką relaksacją pomiędzy stanami wzbudzonymi a podstawowym, przez co wkład w całkowity prąd pochodzący z nich jest znikomy (wstawka na rysunku 4.14).



RYСУNEK 4.14: Prąd płynący przez DRN jako funkcja V_{QD} dla różnej liczby stanów. Kolejne kolory (zielony, czerwony, niebieski, czarny) odpowiadają sytuacjom, w którym do wyliczenia amplitudy prądu uwzględniono odpowiednio 1, 2, 3 i 4 stany elektronowe (o numerach kwantowych 00, 01, 02 i 10). Na panelu w skali logarytmicznej przedstawiono składowe pochodzące od poszczególnych stanów (żółty dla stanu podstawowego) oraz prąd całkowity (czarna linia).

4.2.2 Stany niestacjonarne

W sytuacji, gdy z racji ustawienia potencjałów źródła i drenu w DRN nie znajduje się żaden elektron, bądź znajduje się jeden, który nie może opuścić struktury, transport nie odbywa się. Zmiana napięcia źródło-dren powoduje zmianę obsadzenia i przepływ prądu. Szybkość zmiany obsadzenia dana jest przez różnicę prądu wpływającego i wypływającego:

$$\dot{q} \equiv e\dot{\rho} = e\Gamma^L(1 - \rho) - e\Gamma^R\rho, \quad (4.20)$$

stąd:

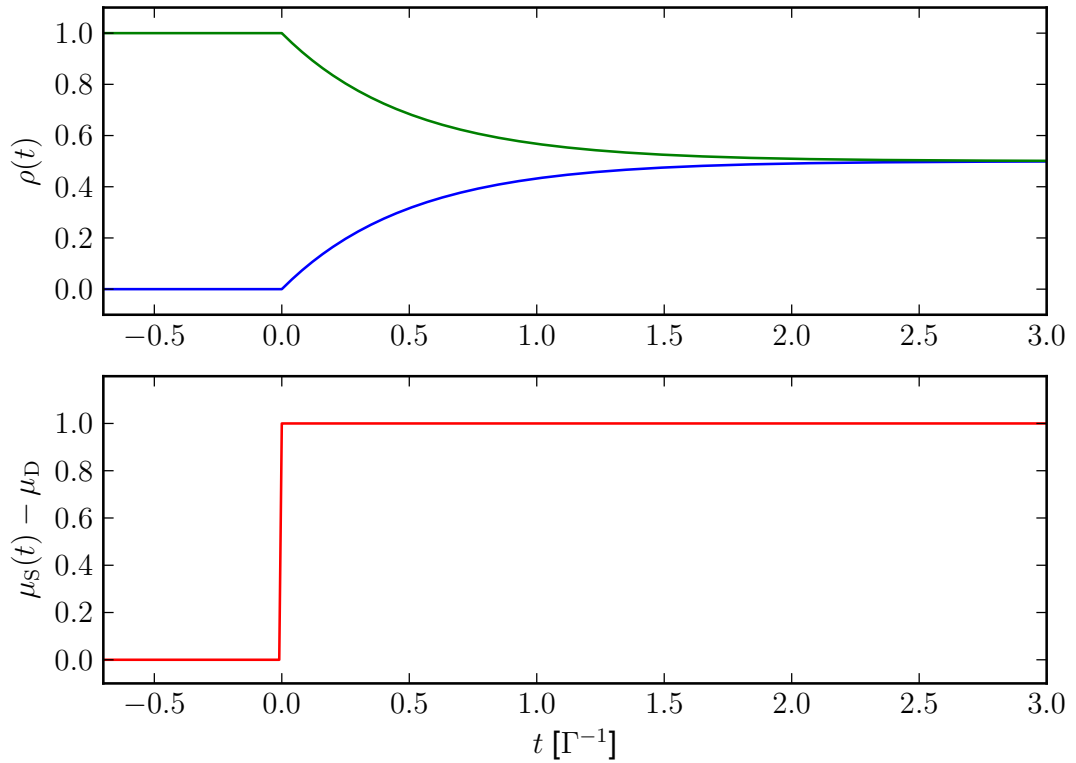
$$\rho(t) = \frac{\Gamma^L}{\Gamma^L + \Gamma^R} + C_1 e^{-(\Gamma^L + \Gamma^R)t}. \quad (4.21)$$

W sytuacji, gdy DRN w chwili t_0 jest pusty ($\rho(0) = 0$), wzór opisujący obsadzenie stanów wygląda następująco (czerwona linia na wykresie 4.15):

$$\rho(t) = \frac{\Gamma^L}{\Gamma^L + \Gamma^R} \left[1 - e^{-(\Gamma^R + \Gamma^L)t} \right], \quad (4.22)$$

zaś dla sytuacji, gdy w DRN znajdował się elektron ($\rho(0) = 1$), zmianę obsadzenia stanu podstawowego można wyrazić następującym wzorem (zielona linia na wykresie 4.15):

$$\rho(t) = \frac{\Gamma^L}{\Gamma^L + \Gamma^R} + \frac{\Gamma^R}{\Gamma^L + \Gamma^R} e^{-(\Gamma^R + \Gamma^L)t}. \quad (4.23)$$



RYSUNEK 4.15: Obsadzenie stanu podstawowego w DRN i różnica potencjałów jako funkcja czasu

Wraz ze wzrostem liczby stanów pomiędzy źródłem a drenem zmienia się liczba równań różniczkowych do rozwiązania. Po uwzględnieniu jednego stanu wzbudzonego układ równań na obsadzenie stanu podstawowego ρ_0 oraz wzbudzonego

ρ_1 przyjmie następującą postać:

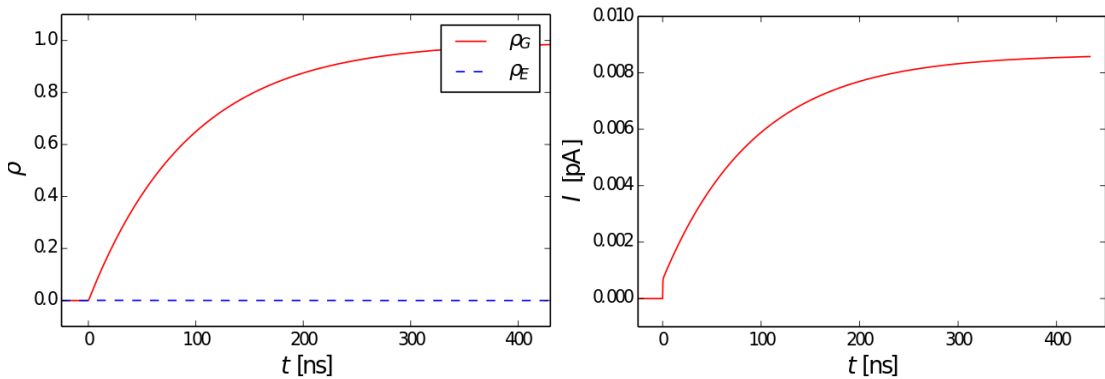
$$e\dot{\rho}_0 = e\Gamma_G^L(1 - \rho_0 - d\rho_1) + wd\rho_1 - e\Gamma_G^R\rho_0, \quad (4.24)$$

$$e\dot{\rho}_1 = e\Gamma_E^L(1 - \rho_0 - d\rho_1) - wd\rho_1 - e\Gamma_E^R\rho_1. \quad (4.25)$$

Rozwiązania numeryczne otrzymano dzięki zastosowaniu metody Eulera. W zależności od potencjału kropki kwantowej wyróżniamy trzy sytuacje:

1. Stan podstawowy i wzbudzony w kropce kwantowej.

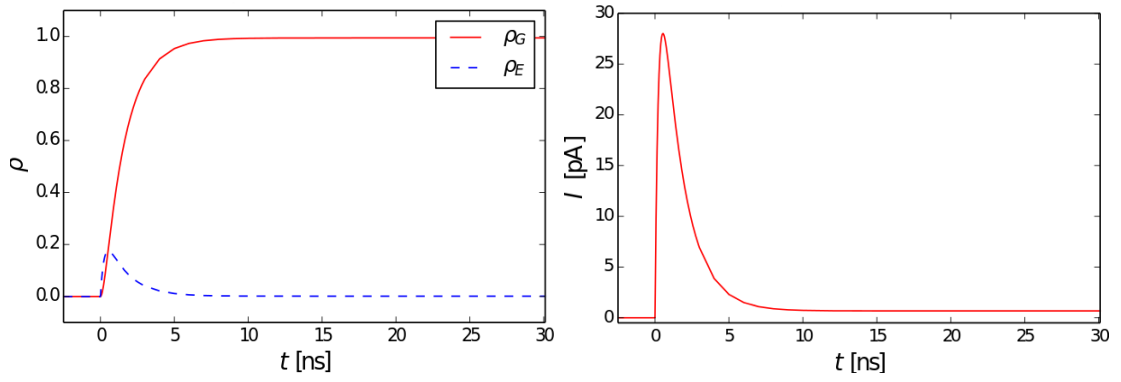
Całkowite obsadzenie struktury (lewy panel rysunku 4.16) jest wysokie z powodu niskiej częstotliwości tunelowania. Czas potrzebny do obsadzenia dowolnego stanu w DRN jest długi. Elektron w stanie wzbudzonym zdąży zrełaksować do stanu podstawowego, przez co transport odbywa się tym stanem (prawy panel rysunku 4.16). Ustalenie równowagi trwa kilkaset nanosekund.



RYСУNEK 4.16: Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego (po lewej stronie) oraz całkowity prąd (prawa strona) dla $V_{QD} = -5$ meV. Obsadzenie stanu podstawowego (wzbudzonego) wykreślono ciągłą czerwoną (przerywaną niebieską) linią.

2. Stan podstawowy w kropce kwantowej, a wzbudzony w pierścieniu.

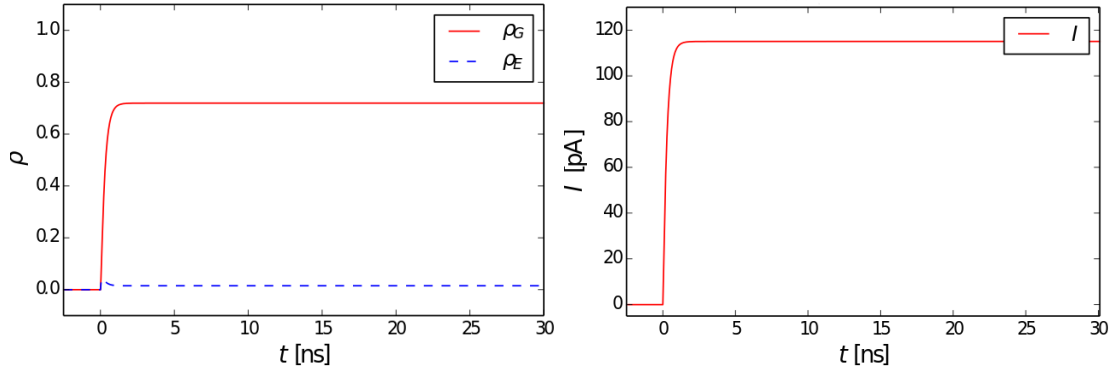
Stan wzbudzony jest silniej sprzężony z elektrodami, przez co przez na samym początku jego obsadzenie jest niezerowe (lewy panel rysunku 4.17) wnosi znaczący wkład do prądu płynącego przez strukturę (prawy panel rysunku 4.17). Szybka relaksacja powoduje, że wkład ten szybko maleje i główną rolę w transporcie zaczyna odgrywać stan podstawowy. Ustalenie równowagi trwa kilkanaście nanosekund.



RYSUNEK 4.17: Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego oraz całkowity prąd dla $V_{\text{QD}} = -1$ meV. Obsadzenie stanu podstawowego (wzbudzonego) wykreślono ciągłą czerwoną (przerywaną niebieską) linią.

3. Stan podstawowy i wzbudzony w pierścieniu kwantowym.

Obydwa stany są dobrze sprzężone, zaś relaksacja jest o rząd wielkości większa od częstotliwości tunelowania (lewy panel rysunku 4.18). Transport odbywa się przez stan podstawowy (prawy panel rysunku 4.18). Ustalenie równowagi jest rzędu pojedynczej nanosekundy.



RYSUNEK 4.18: Obsadzenie stanu podstawowego i wzbudzonego oraz całkowity prąd dla $V_{\text{QD}} = 5$ meV. Obsadzenie stanu podstawowego (wzbudzonego) wykreślono ciągłą czerwoną (przerywaną niebieską) linią.

4.3 Niesymetryczne bariery

Gdy odległość elektrod źródło/dren od DRN jest różna, a zatem częstotliwości tunelowania elektronu z układu do elektrod nie są równe, nie można uprościć

wzoru (4.18). Jednak w sytuacji, gdy obliczenia przeprowadzane są dla jednego stanu, wynik nie zależy od tego czy prąd płynie z lewej strony do prawej, czy odwrotnie. Zwiększenie napięcia między źródłem a drenem wprowadza kolejny stan, który należy uwzględnić w obliczeniach. Stanem podstawowym dla całego zakresu jest stan 00 (liczby kwantowe n i l równe 0). Dla niskich i wysokich V_{QD} pierwszym stanem wzbudzonym jest stan 01, zaś dla wartości V_{QD} bliskich zeru stan 10 (rysunek 2.7). Układ równań opisujący transport elektronu przez strukturę wygląda następująco:

$$\Gamma_1^S (1 - \rho_0 - \rho_1) - w\rho_E - \Gamma_1^D \rho_1 = 0, \quad (4.26)$$

$$\Gamma_0^S (1 - \rho_0 - \rho_1) + w\rho_E - \Gamma_0^D \rho_0 = 0. \quad (4.27)$$

Jego rozwiązanie pozwala nam obliczyć składowe prądu przez poszczególne stany:

$$I_1 = \frac{\Gamma_1^D \Gamma_1^S \Gamma_0^D}{(\Gamma_1^S d + \Gamma_1^D) \Gamma_0^D + (\Gamma_1^S d + \Gamma_0^S d + \Gamma_0^D d) w + \Gamma_0^S \Gamma_1^D}, \quad (4.28)$$

$$I_0 = \frac{\Gamma_0^D ((\Gamma_1^S d + \Gamma_0^S d) w + \Gamma_0^S \Gamma_1^D)}{(\Gamma_1^S d + \Gamma_1^D) \Gamma_0^D + (\Gamma_1^S d + \Gamma_0^S d + \Gamma_0^D d) w + \Gamma_0^S \Gamma_1^D}. \quad (4.29)$$

Γ w ogólności oznacza prawdopodobieństwo tunelowania, indeks górny odpowiada za kierunek transportu: S ze źródła do DRN, D z DRN do drenu. Indeks dolny numeruje stany: 0 (podstawowy) oznacza stan podstawowy, zaś 1 (wzbudzony) wzbudzony. Ze względu na to, że uwzględniono tylko jeden stan wzbudzony (analiza dla większej ilości stanów znajduje się w dalszej części pracy) szybkość relaksacji w i degeneracja stanu wzbudzonego d nie są indeksowane. W przeciwieństwie do układu o symetrycznych barierach zmiana kierunku przepływu prądu zmienia końcową postać wzoru określającego amplitudę prądu. Wzór ogólny na prąd w kierunku przewodzącym (I_f) i zaporowym (I_r) przyjmuje wtedy następującą postać:

$$I_r = e \frac{\Gamma_0^S (\Gamma_1^S + dw) (\Gamma_0^D + \Gamma_1^D)}{(\Gamma_0^D + \Gamma_0^S) (\Gamma_1^S + dw) + d \Gamma_1^D (\Gamma_0^S + w)}, \quad (4.30)$$

$$I_f = -e \frac{\Gamma_0^D (\Gamma_1^D + dw) (\Gamma_0^S + \Gamma_1^S)}{(\Gamma_0^D + \Gamma_0^S) (\Gamma_1^D + dw) + d \Gamma_1^S (\Gamma_0^D + w)}. \quad (4.31)$$

Różnica pomiędzy wartością natężenia prądu przepływającego w różnych kierunkach występuje między innymi w prostownikach opartych na potrójnych kropkach kwantowych [117], nanodrutach [118] czy diodach półprzewodnikowych i jest wykorzystywana do prostowania napięcia przemiennego oraz demodulacji sygnałów w odbiornikach radiowych. Przy odpowiednio dobranych parametrach DRN jest w stanie wykazać podobne zachowanie. Warunkiem wykorzystania DRN w roli prostownika jest złamanie symetrii zarówno $\Gamma^S \ll \Gamma^D$ jak i $\Gamma_G \ll \Gamma_E$, z czego pierwszy warunek można spełnić dobierając odpowiednio odległości elektrod. W prawdzie stan podstawowy jest gorzej sprzężony dla całego zakresu V_{QD} , jednak dla wysokich V_{QD} różnica sprzężeń jest niewystarczająca by różnica w przepływie prądu była widoczna, a dla niskich V_{QD} prąd płynący przez układ jest niemierzalny. W związku z tym drugi warunek jest spełniony dla określonego przedziału V_{QD} , w którym wzór można uprościć do poniższej formy:

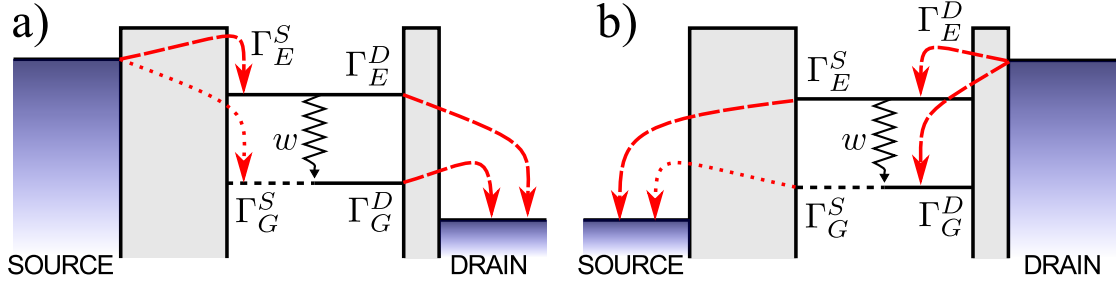
$$I_f = -e \frac{d\Gamma_E^S(\Gamma_E^D + w)}{\Gamma_E^D + dw \left(1 + \frac{\Gamma_E^S}{\Gamma_G^D}\right)}, \quad (4.32)$$

$$I_r = e \frac{\Gamma_G^S(w + \Gamma_E^S)}{w}. \quad (4.33)$$

Dla kierunku przewodzenia, którego schemat został przedstawiony po lewej stronie na rysunku 4.19 elektron znajdujący się w źródle może obsadzić jeden z dwóch stanów DRN:

- stan wzbudzony, z którego może przetunelować do drenu lub zrelaksować do stanu podstawowego,
- stan podstawowy, który może opuścić tunelując do drenu.

W kierunku zaporowym [rysunek 4.19 b)] sytuacja wygląda podobnie, z tym że elektron znajdujący się w stanie podstawowym (czy to przez tunelowanie z elektrody, czy przez relaksację), nie jest w stanie opuścić układu z racji słabego sprzężenia z elektrodą. Blokada kulombowska uniemożliwia dodanie kolejnego elektronu do układu, przez co prąd nie płynie przez strukturę.



RYSUNEK 4.19: Schemat działania prostownika [61]. Po lewej (prawej) kierunku przewodzenia (zaporowy). Przerywane czerwone linie odpowiadają za tunelowanie elektronu z i do elektrod, czerwona kropkowana oznacza, że stan jest na tyle słabo sprzężony, że odpowiadający mu prąd jest poniżej granicy mierzalności. Czarna strzałka to relaksacja orbitalna.

Ustalając konkretną odległość układu od elektrod definiujemy ogólny stosunek zależnej od niej częstotliwości tunelowania do relaksacji, która zależy tylko i wyłącznie od cech układu, jej zależność od potencjału kropki kwantowej (więcej w rozdziale 3) i dla całego zakresu V_{QD} jest rzędu gigaherców. W związku z tym poniżej zostaną rozważone trzy reżimy opisujące stosunek częstotliwości tunelowania do szybkości relaksacji. Następnie zostaną podane wyniki uwzględniające obecność 3 stanów o potencjale chemicznym pomiędzy potencjałem źródła a drenu.

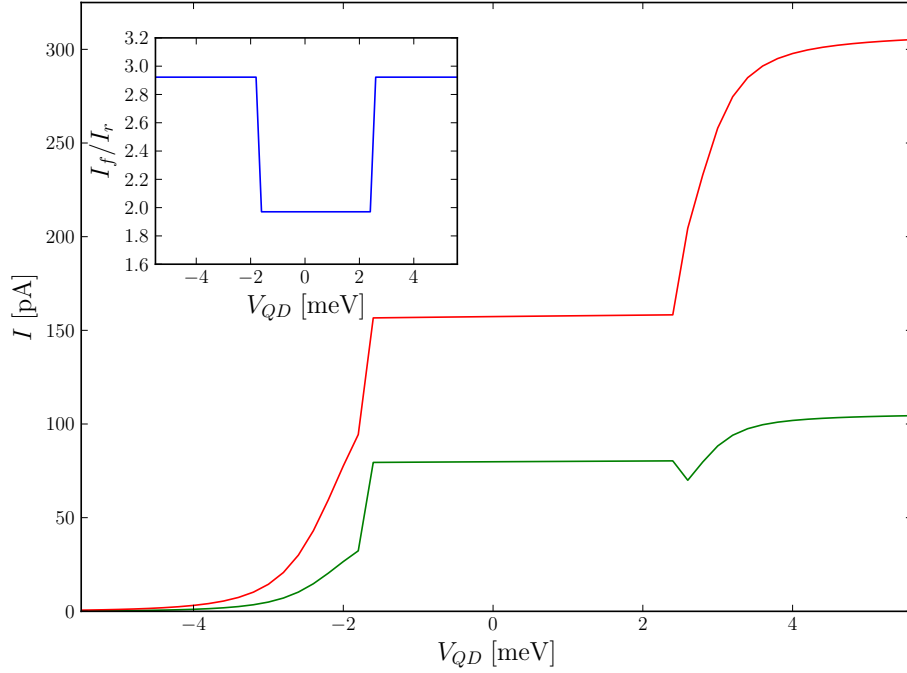
4.3.1 $\Gamma_{\max} \gg w$

W przypadku, gdy układ znajduje się bardzo blisko elektrod częstotliwość tunelowania jest znacznie wyższa od szybkości relaksacji, co ma miejsce gdy sprzężenie z elektrodami jest wysokie, elektron znajdujący się w stanie wzbudzonym, nie zdąży zrelaksować. Zakładając $\Gamma_D/\Gamma_S = \kappa \gg 1$ stosunek prądów można opisać w następujący sposób jako

$$\frac{I_f}{I_r} \approx d + 1, \quad (4.34)$$

gdzie d jest degeneracją stanu wzbudzonego. Wzór ten jest prawdziwy dla całego zakresu V_{QD} w przypadku układu silnie sprzężonego z elektrodami, wówczas stosunek prądów płynących w kierunkach przewodzącym i zaporowym zależy tylko od degeneracji stanu wzbudzonego (rysunek 4.20). Gdy obie funkcje znajdują się w kropce, prąd płynący w obu kierunkach jest stosunkowo niski. Zwiększenie

potencjału V_{QD} podnosi nieznacznie poziom prądu, ale zarówno w kierunku przewodzenia, jak i zaporowym. Bez względu na wzajemne ułożenie funkcji falowych układ nie spełni roli prostownika.



RYSUNEK 4.20: Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{max} \gg w$. Zielona (czerwona) krzywa to amplituda prądu w kierunku zaporowym (przewodzenia). Na panelu stosunek amplitud prądu w kierunku przewodzenia do amplitudy w kierunku zaporowym. Skok wynika ze zmiany degeneracji związanej z przecięciem się stanów (vide rysunek 2.7).

4.3.2 $\Gamma_{max} \ll w$

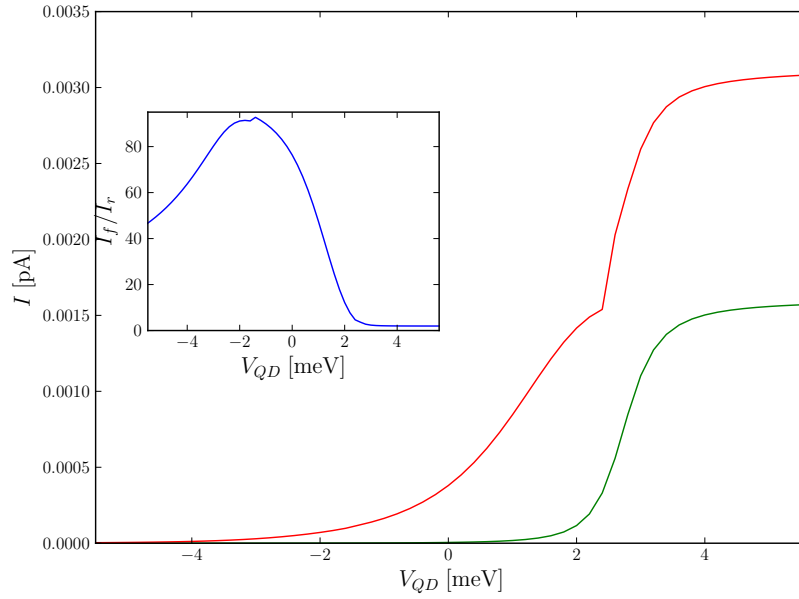
Dla układu znacznie oddalonego od elektrod, czyli w przypadku bardzo słabego sprzężenia układu z elektrodami, elektron znajdujący się w stanie wzbudzonym w większości wypadków zrelaksuje do stanu podstawowego nim opuści strukturę. Uproszczona postać wzoru wyrażającego prąd płynący przez strukturę wygląda następująco:

$$I_f \approx -e(\Gamma_E^S + \Gamma_G^S), \quad (4.35)$$

$$I_r \approx -e\Gamma_G^S. \quad (4.36)$$

W ogólności stosunek prądu płynącego w kierunku przewodzącym, do prądu płynącego w kierunku zaporowym jest równy stosunkowi częstotliwości tunelowania elektronu przez stan wzbudzony, do częstotliwości tunelowania przez stan podstawowy:

$$\frac{I_f}{I_r} \approx \frac{\Gamma_E^S + \Gamma_G^S}{\Gamma_G^S}. \quad (4.37)$$



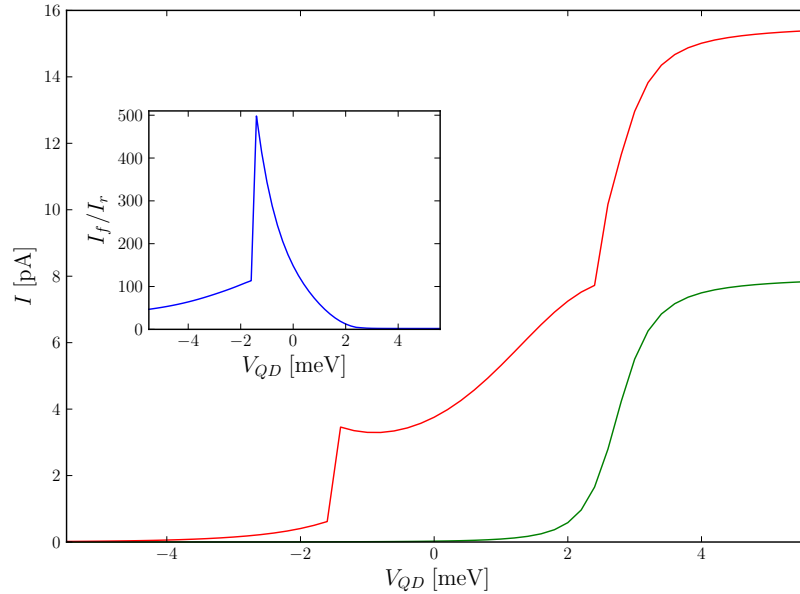
RYSUNEK 4.21: Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{\max} \ll w$. Zielona (czerwona) krzywa to amplituda prądu w kierunku zaporowym (przewodzenia). Na panelu stosunek amplitud prądu w kierunku przewodzenia do amplitudy w kierunku zaporowym. Skok wynika ze zmiany degeneracji związanej z przecięciem się stanów (vide rysunek 2.7).

Stan podstawowy jest zawsze gorzej sprzężony od stanu wzbudzonego (rysunek 4.8), w związku z tym, powyższy stosunek zawsze będzie większy od jedności. Dla niskich wartości V_{QD} obydwa stany znajdują się w kropce, przy czym stan wzbudzony z racji liczby wantowej $l = 1$ ma wyższe prawdopodobieństwo tunelowania. Stosunek prądów wynosi około 40 (rysunek 4.21), jednak składowe prądy są małe dla obydwu kierunków. Dla wartości V_{QD} zbliżonych do zera stany są odseparowane. Stan podstawowy znajduje się głównie w kropkowej części, zaś stan wzbudzony przelewa do pierścieniowej. Powoduje to znaczny wzrost prądu w kierunku przewodzenia, przy nieznacznym wzroście w kierunku zaporowym. W tym

zakresie stosunek Γ_E do Γ_G jest największy i wynosi około 100 (dla wyższej bariery stosunek będzie wyższy). Dla wysokich wartości V_{QD} zarówno stan podstawowy jak i wzbudzony znajdują się w pierścieniu. Prąd płynący przez strukturę jest wysoki bez względu na kierunek. W tym reżimie DRN może zostać zastosowany z powodzeniem jako prostownik dla zakresu V_{QD} od -3 meV do 0 meV.

4.3.3 $\Gamma_{\max} \simeq w$

Gdy częstotliwość relaksacji jest tego samego rzędu co częstotliwość tunelowania, stosunek prądów (I_f/I_r) jest najwyższy.



RYSUNEK 4.22: Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia i zaporowym oraz stosunek tych prądów dla $\Gamma_{\max} \simeq w$. Zielona (czerwona) krzywa to amplituda prądu w kierunku zaporowym (przewodzenia). Na panelu stosunek amplitud prądu w kierunku przewodzenia do amplitudy w kierunku zaporowym. Skok wynika ze zmiany degeneracji związanej z przecięciem się stanów (vide rysunek 2.7).

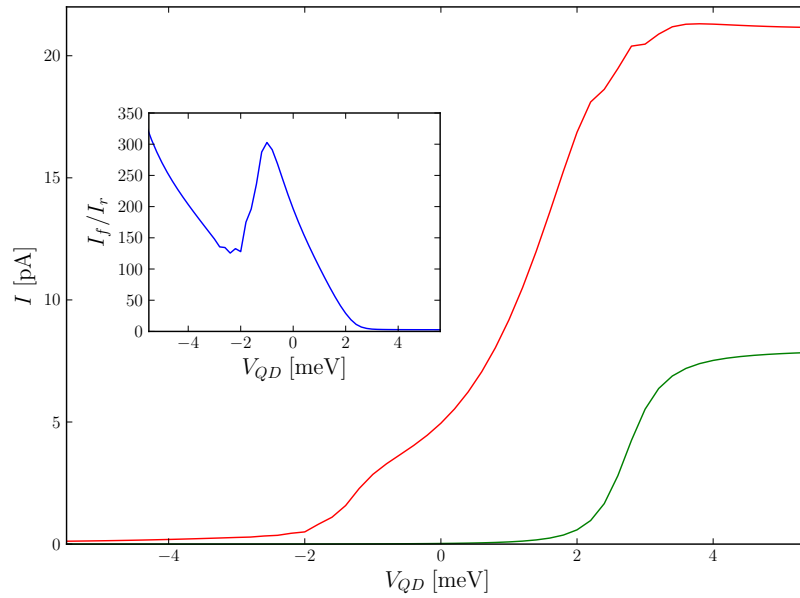
W zakresie ujemnych V_{QD} , gdy obydwa stany znajdują się w kropce, prąd bez względu na kierunek jest niski. Zwiększenie potencjału kropki powoduje stopniowe przelewanie stanu wzbudzonego do pierścienia. Podobnie jak w poprzednim przypadku, prąd w kierunku przewodzenia znacznie wzrasta, przy czym wzrost prądu

w kierunku zaporowym jest niemal nieodczuwalny. Skok na rysunku 4.22 wynika z przecięcia stanów i konieczności uwzględnienia stanu 10 zamiast stanu 01.

W tym przedziale DRN spełnia wymogi z początku rozdziału ($\Gamma^S \ll \Gamma^D$ oraz $\Gamma_G \ll \Gamma_E$) dzięki czemu może funkcjonować jako prostownik o wysokiej skuteczności (dla porównania w kropce kwantowej stosunek prądów wynosi około 8), jednak stany 01 i 10 są na tyle blisko energetycznie, że dobranie poziomów źródła i drenu tak by objąć tylko dwa stany jest trudne. Należy uwzględnić obecność trzeciego stanu.

4.3.4 Zwiększanie liczby stanów

Pojawienie się dodatkowego kanału o wysokiej częstotliwości tunelowania wpływa na zwiększenie natężenia prądu płynącego w kierunku przewodzenia (nawet o rząd wielkości dla ujemnych V_{QD}). Prąd w kierunku zaporowym również wzrasta.



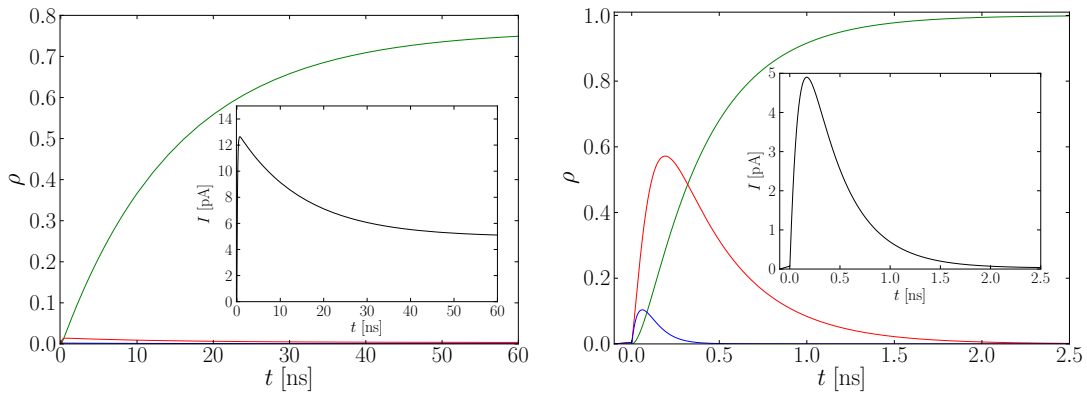
RYSUNEK 4.23: Wykres prądu płynącego przez strukturę w kierunku przewodzenia (czerwona krzywa) i zaporowym (zielona krzywa) oraz stosunek tych prądów (niebieska krzywa na wstawce) uwzględniający obecność trzech stanów.

Powoduje to wzrost stosunku prądów dla niskich V_{QD} do blisko 400. Nie jest to jednak dobry obszar działania dla prostownika z powodu niskiego natężenia prądu w kierunku przewodzenia. Maksimum przypada w tym samym przedziale

V_{QD} co dla dwóch stanów, jednak jego wartość jest niższa z racji wolnej relaksacji pośredniej.

4.3.5 Stany niestacjonarne

Podobnie jak w przypadku symetrycznych barier stan podstawowy odgrywa dominującą rolę w transporcie ładunku. W zależności od kierunku przepływu stany wzbudzone mogą mieć mniejszy, lub większy wkład. Stan równowagowy dla kierunku zaporowego uzyskiwany jest w kilka nanosekund. Poniżej nanosekundy stany wzbudzone znacząco wpływają na prąd (skok widoczny na rysunku 4.24). Powyżej nanosekundy, gdy elektron zdąży zrelaksować, stan podstawowy z powodu słabego sprzężenia jest całkowicie obsadzony uniemożliwiając przepływ prądu (blokada kulombowska). Kierunek przewodzenia osiąga stan równowagowy po znacznie dłuższym czasie. Obsadzenie stanu podstawowego jest znacznie niższe niż w przypadku kierunku zaporowego, a sprzężenie z drenem jest średnie, przez co udział stanów wzbudzonych w przewodnictwie jest wyższy (rysunek 4.24). W efekcie prąd płynący przez strukturę jest mierzalny (5 pA) w przeciwieństwie do prądu w kierunku zaporowym (25 fA).



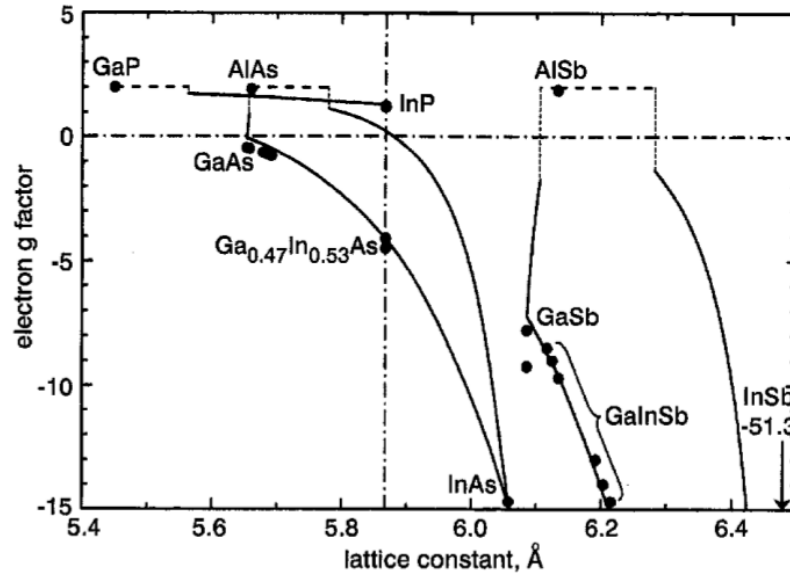
RYSUNEK 4.24: Obsadzenie poszczególnych stanów (zielony 00, niebieski 10, czerwony 01) i amplituda prądu (inset) dla kierunku przewodzenia (lewy panel) i zaporowego (prawy panel)

Rozdział 5

DRN w polu magnetycznym

Aby móc wykorzystywać spin elektronu jako nośnik danych niezbędne jest wprowadzenie pola magnetycznego, którego wpływ na blokadę Kulombowską w pojedynczych i podwójnych kropkach kwantowych został omówiony między innymi w [17, 101, 119–123]. Gdy jest ono różne od zera stany przestają być zdegenerowane ze względu na spin. W najprostszym przypadku wiąże się to z pojawieniem się w polu magnetycznym rozszczepienia poziomów o wartości $\frac{1}{2}g\mu_B B$. Relaksacja spinowa dla jednolitego pod względem materiału układu została omówiona w rozdziale 3. Wpływ pola dla pewnych sposobów wykonania DRN (przypadek CMS z rozdziału 1.2) jest niestandardowy: modyfikacji ulegają funkcje falowe i różnica energetyczna pomiędzy stanami o tych samych liczbach kwantowych, lecz różnych spinach, staje się zmienną zależną od V_{QD} (np. różnica pomiędzy stanami $00 \downarrow$ i $00 \uparrow$ będzie się zmieniać w zależności od V_{QD} mimo stałego pola magnetycznego).

Obecna technologia umożliwia wykonanie DRN, którego części składają się z różnych materiałów (więcej w podrozdziale 1.4.7), przez co rozszczepienie Zeemana jest inne w kropkowej i pierścieniowej części. W zależności od sytuacji istnieje zapotrzebowanie na układy o dodatnim, ujemnym lub bliskim zeru czynnika żyromagnetycznym.



RYSUNEK 5.1: Czynniki żyromagnetyczne dla wybranych półprzewodników III-V grupy [124]

Parametrami determinującymi wartość czynnika żyromagnetycznego g_{el} są szerokość przerwy energetycznej E_G , energia rozszczepienia spin-orbita Δ i energia równoważna elementowi międzypasmowej macierzy pędu (*principal interband momentum matrix*) E_P , przy czym dokładną zależność czynnika żyromagnetycznego od podanych parametrów można wyrazić za pomocą poniższego wzoru [124]:

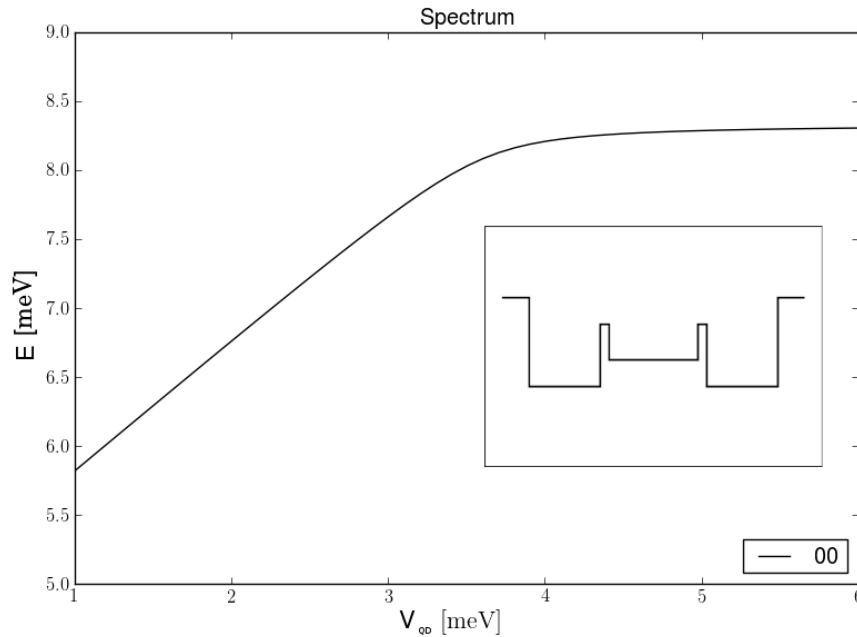
$$g_{el} = 2 - \frac{2}{3} \frac{E_P \Delta}{E_G (E_G + \Delta)}. \quad (5.1)$$

Wynika z niego, że czynnik żyromagnetyczny jest liczbą co najwyżej równą 2, może być równy zero i osiągać dowolne wartości ujemne. Dla GaP, AlAs i AlSb czynnik jest bliski maksymalnemu możliwemu, GaAs posiada go bliski zero, zaś InAs i InSb posiadają ujemny czynnik o dużej wartości bezwzględnej (odpowiednio około -12 i -51). Czynniki żyromagnetyczne dla różnych materiałów zostały zebrane na rysunku 5.1.

5.1 Wpływ czynnika żyromagnetycznego na potencjał definiujący

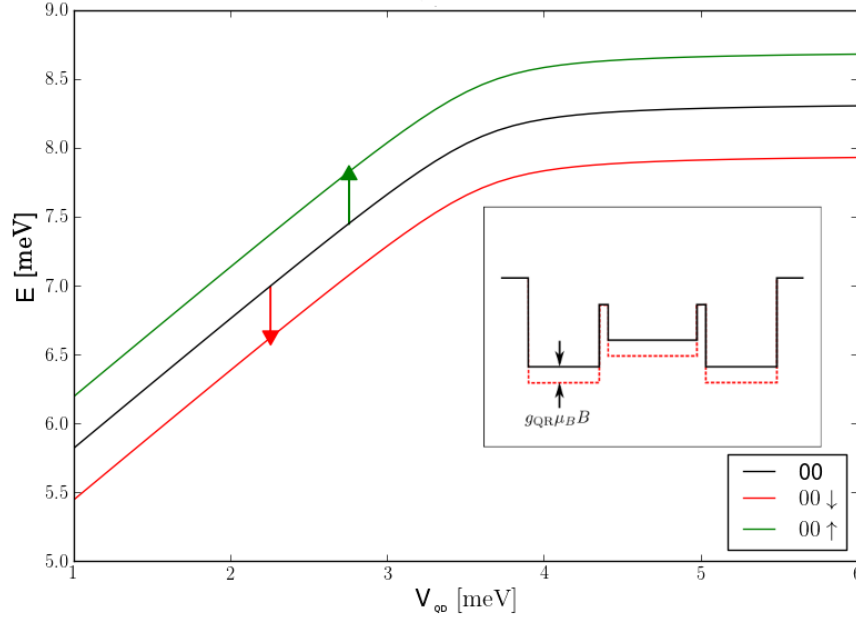
Dla kropki i pierścienia wykonanych z materiałów o takim samym czynniku żyromagnetycznym wystarczy dodać (lub odjąć w zależności od kierunku spinu i pola) od energii własnej wartość $\frac{1}{2}g\mu_B B$. Funkcje falowe zostają bez zmian. W przypadku gdy czynniki żyromagnetyczne materiałów z jakich wykonano kropkę i pierścień są różne, potencjał definiujący strukturę jest inny dla elektronu o spinie \uparrow i \downarrow , przez co energie i funkcje własne różnią się w zależności od spinu. Można je otrzymać rozwiązując osobno dla każdego spinu równanie Schrödingera uwzględniające wpływ pola magnetycznego lub stosując następujące przybliżenie, którego tok myślowy zostanie poniżej przedstawiony w oparciu o stan podstawowy 00. Energia stanu 00 oraz schemat potencjału definiującego dla kolejnych etapów znajduje się na rysunkach 5.2, 5.3 i 5.4. Oznaczmy przez g_{QD} oraz g_{QR} odpowiednio czynniki żyromagnetyczne kropki oraz pierścienia.

1. Rozwiązujemy równanie Schrödingera bez obecności pola magnetycznego.



RYSUNEK 5.2: Przekrój poprzeczny modelowego potencjału definiującego i energii stanu podstawowego bez pola magnetycznego.

2. Do energii dodajemy (odejmujemy) czynnik wynikający z rozszczepienia Zeemana $\frac{1}{2}g_{QR}\mu_B B$. Funkcje falowe oraz kształt potencjału definiującego nie zależą od spinu.



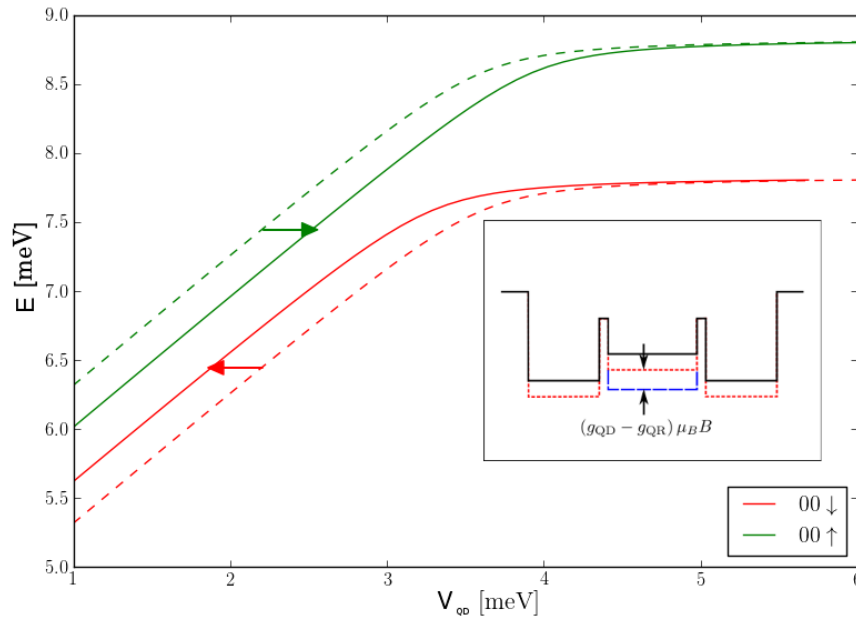
RYСУNEK 5.3: Przekrój poprzeczny potencjału definiującego i energia stanu podstawowego. Zielona (czerwona) linia odpowiada stanowi $00\uparrow$ ($00\downarrow$), czarna linia to energia stanu 00 bez uwzględnienia pola magnetycznego.

3. Przesuwamy wykres na osi V_{QD} o czynnik $\frac{1}{2}(g_{QD} - g_{QR})\mu_B B$, dobieramy odpowiadającą nowej wartości V_{QD} funkcję falową. Wykresy oddalają się od siebie jeśli $g_{QD} > g_{QR}$, w przeciwnym przypadku zbliżają, aż do przecięcia gdy znaki czynników żyromagnetycznych są przeciwne.

Uproszczony wzór opisujący powyższy schemat przyjmuje postać:

$$E_n^\sigma(B \neq 0, V_{QD}) = E_n \left[B = 0, V_{QD} + \sigma \frac{1}{2} (|g_{QD}| - |g_{QR}|) \mu_B B \right] + \sigma \frac{1}{2} |g_{QR}| \mu_B B. \quad (5.2)$$

Przybliżenie to można stosować gdy $\frac{1}{2}(g_{QD} - g_{QR})\mu_B B \ll V_0$. Pozwala to oszacować zachowanie układu w polu magnetycznym zakładając, że energie i funkcje falowe DRN bez pola magnetycznego oraz czynniki żyromagnetyczne są znane,



RYSUNEK 5.4: Przekrój poprzeczny potencjału definiującego i energia stanu podstawowego. Zielona (czerwona) ciągła linia to energia stanu $00 \uparrow$ ($00 \downarrow$), czarna linia to energia stanu 00 bez uwzględnienia pola magnetycznego.

ograniczając przy tym ilość potrzebnych obliczeń. Wyniki zamieszczone w rozprawie zostały uzyskane w oparciu o dokładne obliczenia: dla każdego spinu osobno zdefiniowano potencjał i rozwiązano równanie Schrödingera.

5.2 Transport ładunku

Uwzględnienie pola magnetycznego wywołuje rozszczepienie stanów. Różnica energetyczna pomiędzy stanami o tych samych liczbach kwantowych n i l zależy od przyłożonego pola i materiału z jakiego wykonano strukturę. Wprowadzenie tego czynnika umożliwia zastosowanie DRN jako spinowo spolaryzowanego tranzystora oraz wykorzystanie długich czasów relaksacji spinu w spintronice czy przy realizacji qubitów.

Wprowadzenie spinu umożliwia większą kontrolę nad układem. Dotychczas pierwszy stan wzbudzony był zawsze lepiej sprzężony od stanu podstawowego, co

więcej mimo różnicy w wysokości barier tunelowania stosunek Γ_G do Γ_E pozostawał stały dla wybranego V_{QD} . Dzięki dobraniu odpowiednich materiałów możemy mieć sytuację odwrotną (stan podstawowy lepiej sprzężony od pierwszego stanu wzbudzonego lub poprzez zastosowanie spinowo spolaryzowanych elektrod niezachowany stosunek częstotliwości tunelowania). Równanie opisujące zmianę obsadzenia stanu dla ustalonej różnicy potencjałów ($\mu_S - \mu_D = eV_{SD}$) w ustalonej temperaturze wyraża się wzorem:

$$\left(f_S^i \Gamma_S^i + f_D^i \Gamma_D^i\right) \left(1 - \sum_j \rho_j\right) - \left[(1 - f_S^i) \Gamma_S^i + (1 - f_D^i) \Gamma_D^i\right] \rho_i + W_i = 0, \quad (5.3)$$

gdzie W_i zawiera człony związane z relaksacją orbitalną :

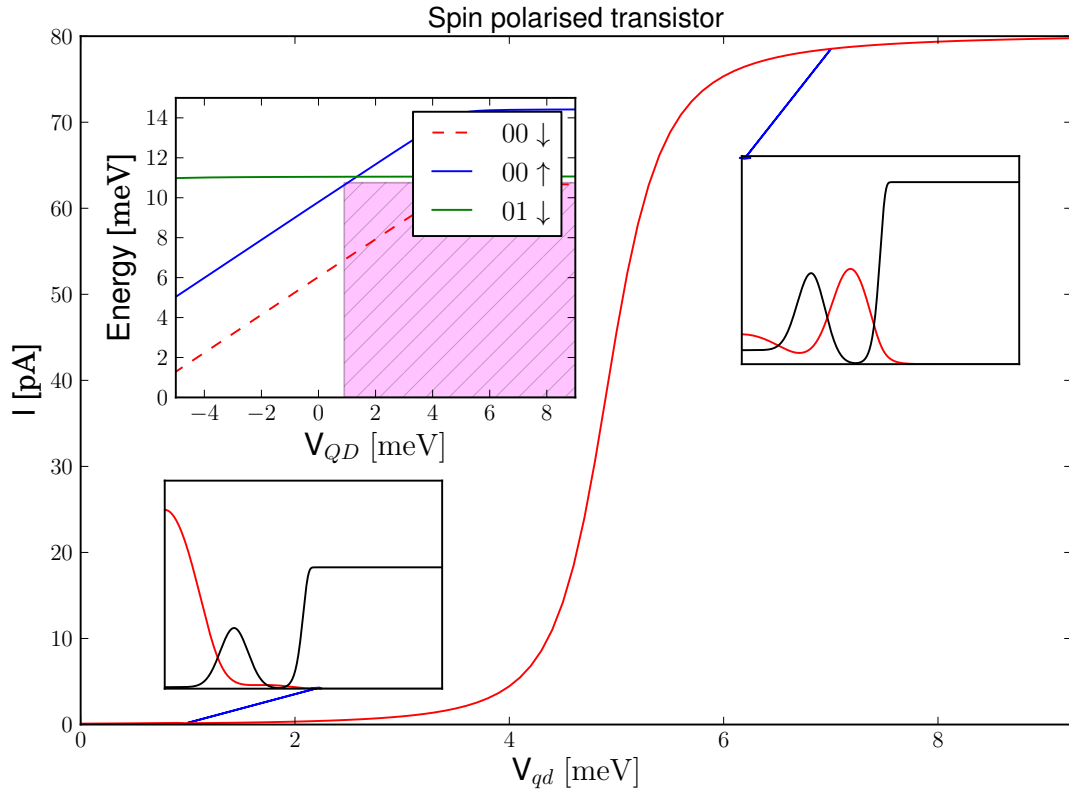
$$W_i = \sum_{j=i+1}^{n_0-1} w_{j \rightarrow i} \rho_j \delta_{\sigma_i \sigma_j} - \sum_{j=0}^{i-1} w_{i \rightarrow j} \rho_j \delta_{\sigma_i \sigma_j}. \quad (5.4)$$

Relaksacja spinowa jest znacznie wolniejsza od relaksacji spinowej i została pominięta w obliczeniach. f_D^i/f_S^i są funkcjami rozkładu Fermiego Diraca dla elektrod, Γ częstotliwościami tunelowania. Stany numerowane są liczbami kwantowymi i kierunkiem spinu ($i = nl\sigma$, ($\sigma = \uparrow\downarrow$)).

W zależności od wzajemnego stosunku czynników żyromagnetycznych rozważono następujące przypadki.

5.2.1 Kropka i pierścień wykonane z jednego materiału

Dla odpowiednio silnego pola magnetycznego i materiału o dużym czynniku żyromagnetycznym możliwe jest zastosowanie DRN jako spinowo spolaryzowanego tranzystora. Dla pola 5 T struktura wykonana z InAs posiada rozszczepienie Zemana na tyle wysokie, że możliwe jest wybranie zakresu, gdzie energia stanu podstawowego ($00 \downarrow$) znajduje się pomiędzy źródłem i drenem, a pierwszego stanu wzbudzonego ($00 \uparrow$ lub $01 \downarrow$) poza nim w całym zakresie przełączania (zacięzione pole na panelu rys. 5.5).



RYSUNEK 5.5: Charakterystyka prądowo-napięciowa DRN w polu magnetycznym. Na panelach funkcje falowe stanu $00 \downarrow$ oraz fragment spektrum energetycznego (lewy górny róg).

Działanie tranzystora zostało wyjaśnione w rozdziale 4. Jedyną różnicą jest spinowa polaryzacja płynącego prądu. Tak wykonany DRN może pełnić również rolę filtra spinowego, gdyż spin o kierunku przeciwnym niż wskazany nie może tunelować przez układ. W celu zwiększenia stosunku prądów w stanach *on* i *off* należy zwiększyć pole magnetyczne bądź zastosować InSb jako materiał DRN. Pozwoli to na manipulacje V_{QD} w większym zakresie i tym samym zwiększenie stosunku prądów w stanach *on* i *off*.

5.2.2 Kropka i pierścień wykonane z różnych materiałów

Utworzenie DRN z materiałów o czynnikach żyromagnetycznych o przeciwnych znakach (na przykład kropka wykonana z AlSb, a pierścień GaSb) powoduje, że stany $00 \downarrow$ i $00 \uparrow$ przecinają się przy określonej wartości V_{QD} . Prowadzi to do sytuacji, w której stan podstawowy znajduje się w pierścieniu, a pierwszy stan

wzbudzony w kropce. Dotychczas stan podstawowy ”przelewał się” do kropki przy wyższym V_{QD} niż pierwszy stan wzbudzony. Konsekwencją tego jest występowanie zjawiska ujemnego przewodnictwa różniczkowego (*negative differential conductance* - NDC) [125], które w odróżnieniu od dodatniego przewodnictwa różniczkowego (*positive differential conductance* - PDC) nie występuje w DRN w zerowym polu magnetycznym, bądź wykonanym z materiałów o zbliżonych czynnikach żyromagnetycznych tego samego znaku.

Zjawisko NDC znajduje zastosowanie między innymi w oscylatorach wysokiej częstotliwości, konwerterach sygnałów analogowych do cyfrowych, multiplekserach oraz jako potencjalne realizacje bramek logicznych; oscylatorów Blocha i szybko przełączalnych urządzeń elektronicznych [126–130]. Przykładowe realizacje takich układów to supersieci GaAs/AlAs [131], trójterminalowe urządzenia [132], nanoukłady oparte o grafen [133–135].

W celu określenia czy układ charakteryzuje się dodatnim czy ujemnym przewodnictwem różniczkowym należy przeanalizować jak zmienia się amplituda płynącego prądu w zależności od napięcia *source-drain*, a dokładniej zależnej od niego ilości dostępnych stanów w *bias window*. Prąd płynący odpowiednio przez jeden (L - *low bias*) i dwa (H - *high bias*) można wyrazić następującymi wzorami:

$$I_L = e \frac{\Gamma_D^G \Gamma_S^G}{\Gamma_D^G + \Gamma_S^G}, \quad (5.5)$$

$$I_H = -e \frac{\Gamma_D^G \Gamma_S^E \Gamma_D^E + \Gamma_S^G \Gamma_D^E \Gamma_D^G}{(\Gamma_D^E + \Gamma_S^E) \Gamma_D^G + \Gamma_D^E \Gamma_S^G}, \quad (5.6)$$

gdzie G, E oznaczają stan o liczbach kwantowych 00 różniących się tylko kierunkiem spinu. Wprowadzając oznaczenia:

$$\frac{\Gamma_D^G}{\Gamma_S^G} \equiv \kappa, \quad \frac{\Gamma_D^E}{\Gamma_S^G} = \frac{\Gamma_S^E}{\Gamma_S^G} \equiv \iota, \quad (5.7)$$

względna zmiana natężenie prądu przy dodaniu drugiego stanu wygląda następująco:

$$\eta \equiv \frac{I_H}{I_L} = (\iota + 1) \frac{\kappa + 1}{\kappa + 2}, \quad (5.8)$$

gdzie κ jest parametrem zewnętrznym opisującym stosunek barier tunelowania z układu do źródła i drenu i jest stałe dla każdego V_{QD} . ι opisuje stosunek częstości tunelowania stanu wzbudzonego do podstawowego i zależy od V_{QD} i jest niezależny od κ ani od przepływu prądu, chyba, że elektrody są spolaryzowane spinowo.

Z uwagi na parametr κ rozróżniamy trzy sytuacje:

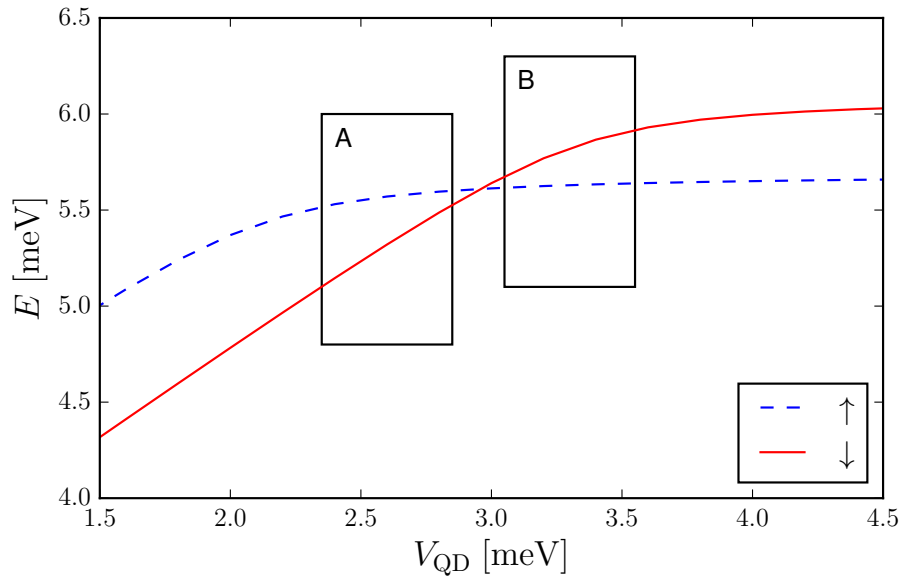
1. $\kappa \gg 1$: w sytuacji gdy dren jest dużo silniej sprzężony z układem niż źródło, dla każdego ι współczynnik η jest większy od 1, co oznacza, że w całym zakresie V_{QD} występuje dodatnie przewodnictwo różniczkowe.
2. $\kappa = 1$ dla symetrycznych barier wzór (5.8) można uprościć do postaci $\eta = \frac{2}{3}(\iota + 1)$. W tej sytuacji stan podstawowy i wzbudzony są równo obsadzone. Dodanie kolejnego stanu może zarówno zwiększyć, jak i zmniejszyć natężenie płynącego prądu, co ma miejsce gdy $\Gamma_E/\Gamma_G < \frac{1}{2}$. W skrajnym przypadku ($\iota \approx 0$) następuje spadek amplitudy prądu o $\frac{1}{3}$. Występuje zarówno dodatnie, jak i ujemne przewodnictwo różniczkowe.
3. $\kappa \ll 1$ stosunek prądów można przybliżyć przez $\eta = \frac{1}{2}(\iota + 1)$. Słabsze sprzężenie z drenem dodatkowo utrudnia tunelowanie słabiej sprzężonych elektronów, przez co spadek amplitudy płynącego prądu występuje, gdy stan wzbudzony jest nawet nieznacznie słabiej sprzężony od podstawowego. Dla $\iota \ll 1$ następuje spadek amplitudy prądu nawet o połowę. Występuje zarówno dodatnie, jak i ujemne przewodnictwo różniczkowe.

W tabeli poniżej zestawiono względną zmianę natężenia prądu w zależności od parametrów κ oraz ι . Najsilniejszy spadek amplitudy prądu występuje dla $\kappa \ll 1$.

κ	$\ll 1$		1		$\gg 1$
ι	$\ll 1$	$\gg 1$	$\ll 1$	$\gg 1$	
η	$\approx \frac{1}{2}$ (NDC)	$\gg 1$ (PDC)	$\approx \frac{2}{3}$ (NDC)	$\gg 1$ (PDC)	> 1 (PDC)

Przy zastosowaniu materiałów o czynnikach żyromagnetycznych o różnych znakach następuje przecięcie stanów $00 \downarrow$ i $00 \uparrow$ na spektrum energetycznym (rys. 5.6). Oznacza to, że w wybranym zakresie V_{QD} stan podstawowy ma silniejsze sprzężenie Γ od stanu wzbudzonego, czyli $\iota < 1$.

W celu wyjaśnienia mechanizmu odpowiedzialnego za PDC i NDC w DRN przeprowadzono obliczenia na układzie o czynnikach żyromagnetycznych $g_{QR} = 2$ oraz $g_{QR} = -2$ w polu 5T. Promień struktury wynosi 50 nm, bariera ma wysokość 45 meV i jej środek jest oddalony o 25 nm od środka układu. Potencjał drenu jest ustalony na poziomie poniżej niższego energetycznie stanu. Zwiększając potencjał źródła zwiększamy jednocześnie różnicę potencjałów.

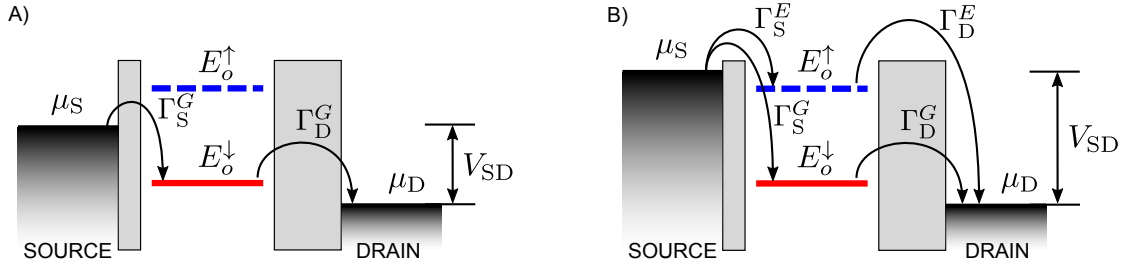


RYSUNEK 5.6: Spektrum energetyczne dla DRN wykonanego z różnych materiałów w polu magnetycznym

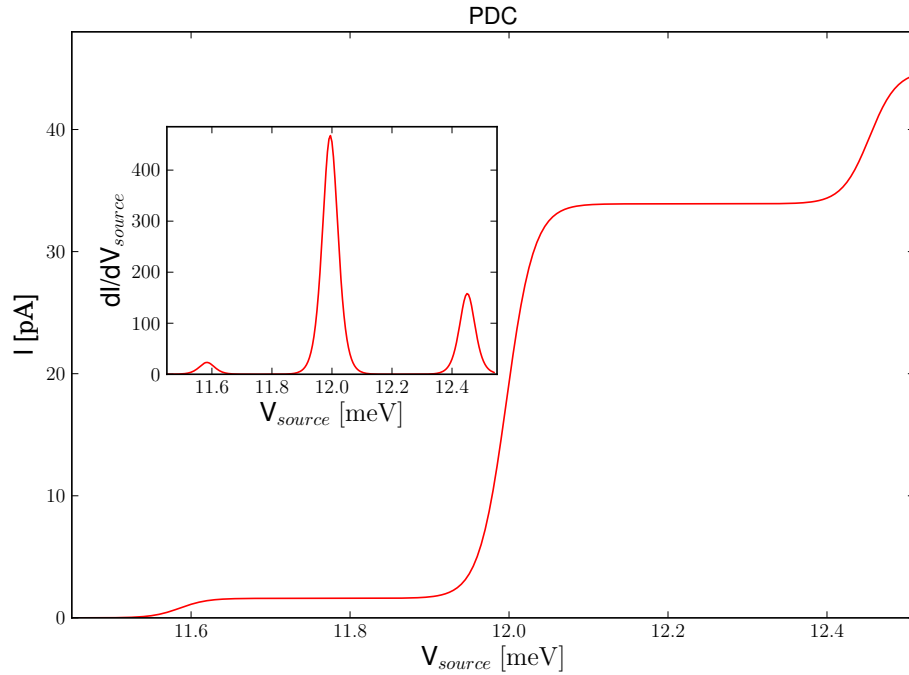
Na rysunku 5.6, przedstawiającym spektrum takiego układu, zaznaczono dwa obszary:

1. lewy prostokąt (A): obszar gdzie stan podstawowy jest słabiej sprzężony niż stan wzbudzony. Jest to sytuacja z jaką mieliśmy do czynienia w DRN bez pola magnetycznego. Schematyczne przedstawienie stanów biorących udział w transporcie dla niskiej i wysokiej różnicy potencjałów znajduje się na rysunku 5.7. Stan podstawowy jest bardzo słabo sprzężony ze źródłem, przez

co amplituda prądu jest mała. Zwiększenie napięcia powoduje pojawienie się dodatkowego, dobrze przewodzącego stanu i tym samym gwałtowny wzrost natężenia widoczny na rysunku 5.8.



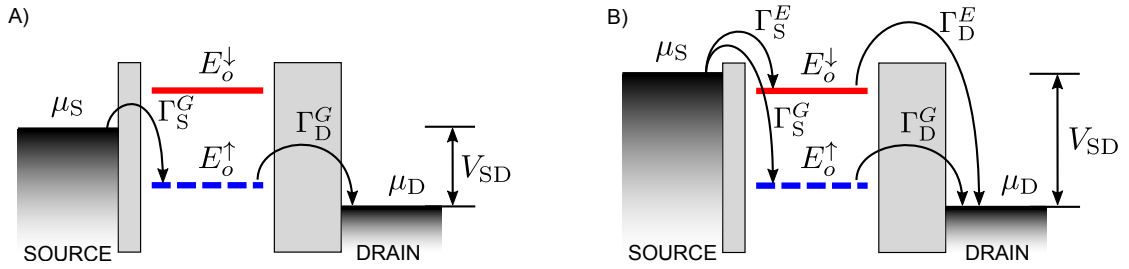
RYSUNEK 5.7: Schemat stanów biorących udział w transporcie dla PDC. A) jeden słabo sprzężony z elektrodami stan znajduje się w *bias window*. B) po zwiększeniu potencjału chemicznego źródła, do *bias window* został dodany drugi, dobrze sprzężony stan. Strzałki obrazują procesy tunelowania z i do elektrod. Kolory poziomów energetycznych są spójne ze spektrum z rysunku 5.6 [136].



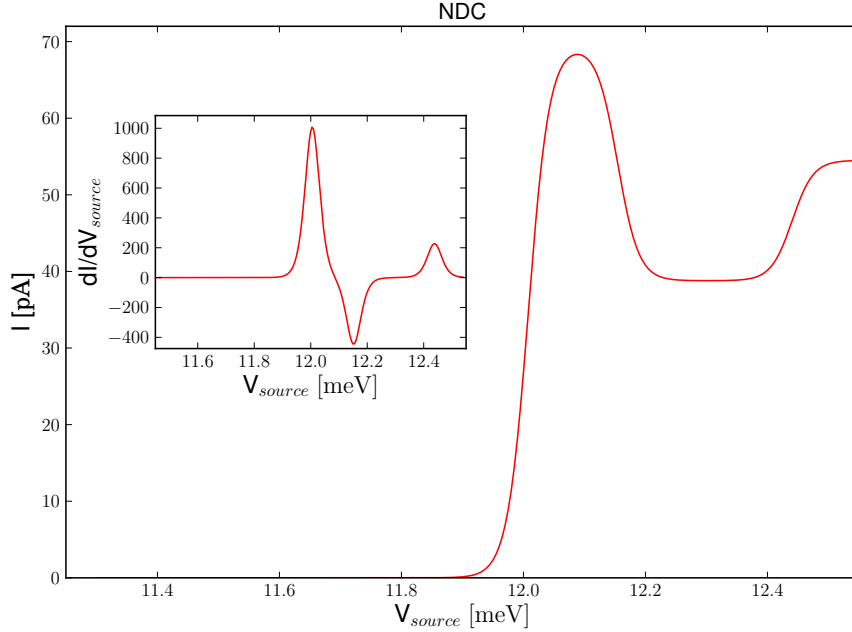
RYSUNEK 5.8: Natężenie prądu i przewodnictwo różniczkowe (wstawka) dla układu wykazującego PDC [136].

2. prawy prostokąt (B): obszar, w którym stan podstawowy jest lepiej sprzężony niż stan wzbudzony. Sytuacja ta ma miejsce tylko i wyłącznie wtedy, gdy czynniki żyromagnetyczne kropki i pierścienia mają przeciwne znaki. Schematyczne przedstawienie stanów biorących udział w transporcie dla niskiej

i wysokiej różnicy potencjałów znajduje się na rysunku 5.9. Wraz z pojawieniem się stanu podstawowego w *bias window* następuje gwałtowny wzrost amplitudy przepływającego prądu - wynika to z dobrego sprzężenia z elektrodami. Zwiększenie napięcia wprowadza słabo przewodzący stan, co sprawia, że natężenie spada o blisko połowę, a przewodnictwo różniczkowe osiąga wartość ujemną w podanym zakresie (rysunek 5.10).

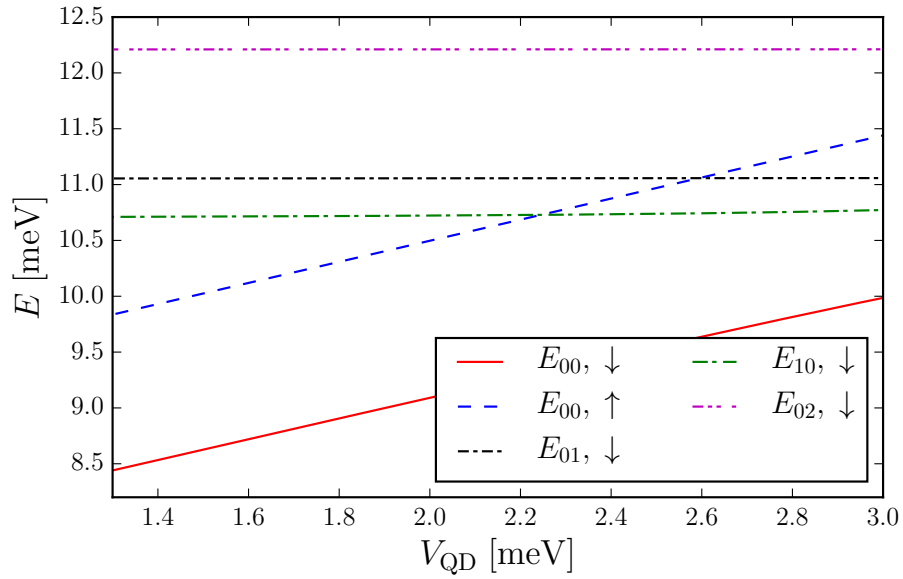


RYSUNEK 5.9: Schemat stanów biorących udział w transporcie dla NDC. A) jeden dobrze sprzężony z elektrodami stan znajduje się w *bias window*. B) po zwiększeniu potencjału chemicznego źródła do *bias window* został dodany drugi, słabiej sprzężony stan. Strzałki obrazują procesy tunelowania z i do elektrod. Kolory poziomów energetycznych są spójne ze spektrum z rysunku 5.6. [136]



RYSUNEK 5.10: Natężenie prądu i przewodnictwo różniczkowe (wstawka) dla układu wykazującego NDC [136].

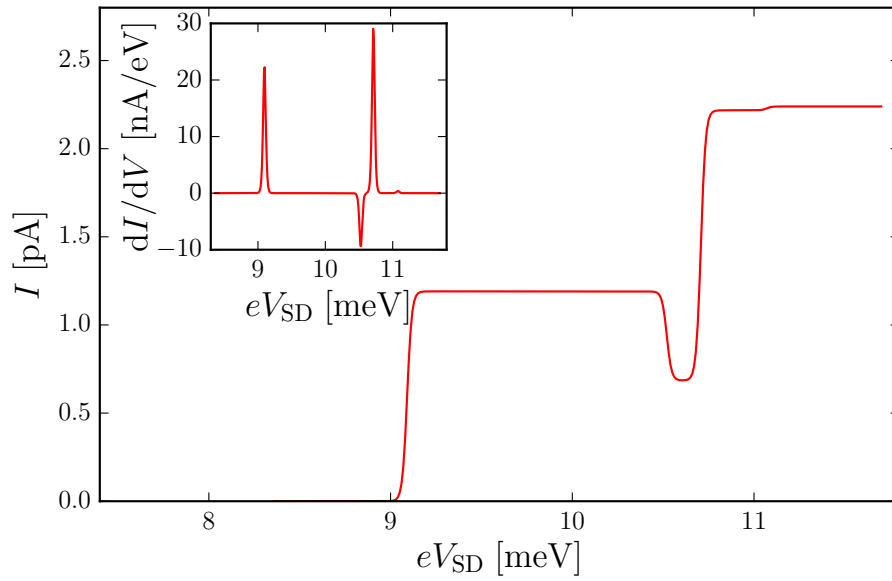
Dodatnie czynniki żyromagnetyczne występują w AlAs, AlSb oraz GaP. NDC można uzyskać stosując czynniki tego samego znaku, przy czym wartość bezwzględna współczynnika żyromagnetycznego kropki musi być mniejsza niż w pierścieniu. Przykładowo kropkę można wykonać z InGaAs ($g_{\text{QD}} = -4$) a pierścień z InAs ($g_{\text{QD}} = -12$) i umieścić w polu magnetycznym, obliczenia przeprowadzono dla pola 5 T, a wyniki umieszczono na rysunku 5.11.



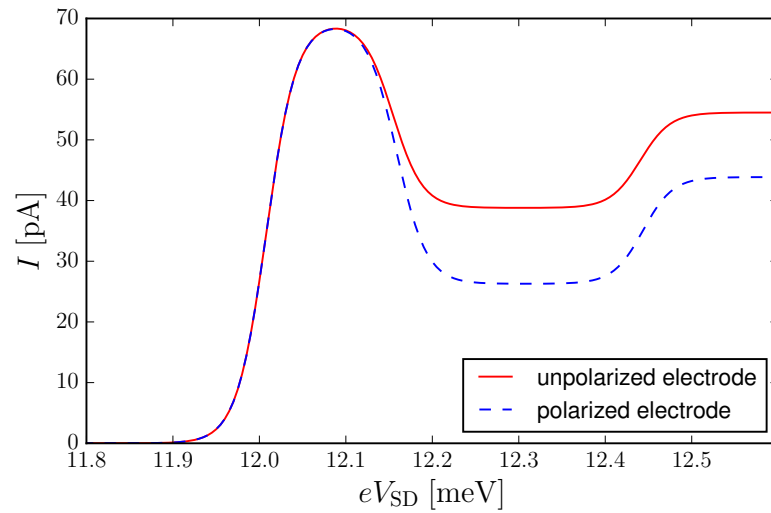
RYSUNEK 5.11: Spektrum układu wykonanego z InGaAs/InAs

Stanem podstawowym w całym zakresie V_{QD} jest stan $00 \downarrow$, stan $00 \uparrow$ jest nieznacznie słabiej sprzężony, ale wystarczająco dobrze, by wystąpił spadek amplitudy prądu widoczny na rysunku 5.12.

Innym sposobem umożliwiającym otrzymanie NDC jest zastosowanie spino-wo spolaryzowanej elektrody [137], najlepiej drewnu. Sprawia to, że stosunek Γ_D/Γ_S dla źródła jest inny niż dla drewnu. Częstość tunelowania z/do spolaryzowanej elektrody dla jednego ze spinów jest zmniejszona o pewien czynnik (zależny od stopnia polaryzacji) w stosunku do niespolaryzowanej elektrody umieszczonej w takiej samej odległości. W związku z tym nie można zastosować uproszczenia użytego we wzorze (5.8) czyli $(\Gamma_D^E/\Gamma_D^G \neq \Gamma_S^E/\Gamma_S^G)$. W ten sposób zwiększa się spadek prądu w stopniu widocznym na rysunku 5.13.



RYSUNEK 5.12: Natężenie prądu w funkcji V_{SD} i przewodnictwo różniczkowe. Wstawka pokazuje przewodnictwo różniczkowe w funkcji V_{SD} .



RYSUNEK 5.13: Natężenie prądu jako funkcja V_{SD} dla spinowo spolaryzowanej (niebieska przerywana) i niespolaryzowanej (czerwona ciągła) elektrody. [136]

Najsilniejsze zjawisko NDC można otrzymać łącząc powyższe metody: stosując materiały o skrajnie różnych czynnikach żyromagnetycznych, np. kropkę z AlSb ($g \simeq 2$), a pierścień z InSb ($g = -51.3$) w silnym polu magnetycznym i ze spolaryzowaną elektrodą.

Podsumowanie

Postęp technologiczny umożliwił otrzymanie układów tak skomplikowanych jak DRN. Jego nietypowa budowa pozwala na wykorzystanie nieosiągalnej dotąd inżynierii funkcji falowych, która otwiera wiele możliwości. Wysoka sterowalność struktury pozwala na manipulację wieloma cechami układu w tym m.in. szybkością relaksacji, amplitudą przepływającego prądu czy absorpcją fotonów tylko i wyłącznie przy manipulacji napięciem na jednej bramce.

Wprowadzona pomiędzy kropką a pierścieniem bariera pozwoliła na odseparowanie funkcji falowych stanu podstawowego i wzbudzonego co jednocześnie spowodowało wzrost czasu relaksacji o kilka rzędów czyniąc tym samym DRN potencjalną realizacją qubitów.

Manipulacja funkcjami falowymi pozwala również kontrolować amplitudę prądu przepływającego przez układ, co znajduje zastosowanie w elektronice i spintro-nice. W zależności od napięcia na bramce układ może być zarówno izolatorem jak i przewodnikiem. DRN w odróżnieniu od kropki i pierścienia może pełnić również rolę prostownika oraz wykazywać ujemne przewodnictwo różniczkowe.

Nanoukłady stanowią ważny aspekt współczesnego przemysłu i nauki. Możliwość kontroli funkcji falowej elektronu jaką oferuje DRN może odegrać ważną rolę w opracowywaniu nowych teorii oraz technologii.

Dodatek A

Metody obliczeniowe

Metoda Numerova

Metoda Numerova [65, 66] jest iteracyjną metodą numeryczną pozwalającą na rozwiązywanie równań różniczkowych nie zawierających pochodnej pierwszego rzędu. Przy tym samym kroku obliczeniowym charakteryzuje się większą dokładnością od metody Runge-Kutty [138], wymaga mniej obliczeń, przez co jest szybsza, jednak ma ograniczone zastosowanie: w równaniu nie może wystąpić pochodna pierwszego stopnia, a jedynie równania o następującej postaci mogą być rozwiązane przy jej wykorzystaniu:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -u(x)f(x) + g(x). \quad (\text{A.1})$$

gdzie funkcje $u(x)$ i $f(x)$ są dowolnymi funkcjami. Metoda Numerova zostanie omówiona przy założeniu, że funkcja $g(x) = 0$.

Z uwagi na specyfikę wykonywania obliczeń numerycznych konieczne jest zastąpienie pochodnej funkcji ilorazem różnicowym, czyli różnicą wartości funkcji

$[f(x + \delta x) - f(x - \delta x)]$ podzieloną przez różnicę argumentu funkcji ($2\delta x$). Rozwijając powyższy zapis funkcji w szereg Taylora otrzymujemy:

$$f(x + \delta x) = f(x) + \frac{df}{dx} + \frac{\delta x^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{\delta x^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} + \frac{\delta x^4}{24} \frac{d^4 f}{dx^4} + \dots, \quad (\text{A.2})$$

$$f(x - \delta x) = f(x) - \frac{df}{dx} + \frac{\delta x^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2} - \frac{\delta x^3}{6} \frac{d^3 f}{dx^3} + \frac{\delta x^4}{24} \frac{d^4 f}{dx^4} + \dots. \quad (\text{A.3})$$

Po dodaniu równań (A.2) i (A.3) stronami i wykonaniu prostych operacji matematycznych otrzymujemy:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \delta x) - 2f(x) + f(x - \delta x)}{\delta x^2} + O(\delta x^6), \quad (\text{A.4})$$

gdzie δx jest krokiem obliczeniowym (różnicą argumentu funkcji). Dokonując prostych przekształceń otrzymujemy:

$$f(x + \delta x) = 2f(x) - f(x - \delta x) + \delta x^2 \frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{\delta x^4}{12} \frac{d^4 f(x)}{dx^4}. \quad (\text{A.5})$$

Równanie różniczkowe (A.1) nie zawiera pochodnej pierwszego rzędu. W związku z tym można oznaczyć prawą stronę równania (A.1): $F(x) = -u(x)f(x) + g(x)$ i wstawić w miejsce pochodnej drugiego rzędu funkcji $f(x)$:

$$f(x + \delta x) = 2f(x) - f(x - \delta x) + \delta x^2 F(x) + \frac{\delta x^4}{12} \frac{d^2 F}{dx^2}. \quad (\text{A.6})$$

Drugą pochodną F w powyższym równaniu należy zastąpić ilorazem różnicowym, a następnie pogrupować wyrazy podobne. Po wykonaniu powyższych kroków otrzymujemy wzór iteracyjny na funkcję $f(x)$:

$$f(x + \delta x) = \frac{\left[2 - \frac{5\delta x^2}{6}u(x)\right]f(x) - \left[1 + \frac{\delta x^2}{12}u(x - \delta x)\right]f(x - 1)}{1 + \frac{\delta x^2}{12}u(x + \delta x)}. \quad (\text{A.7})$$

Dla znanej wartości początkowej funkcji $f(x)$ oraz wzoru funkcji $u(x)$, możemy wyznaczyć numeryczną postać funkcji $f(x)$ stosując obliczenia iteracyjne z krokiem δx .

Szczególnym przypadkiem równania różniczkowego stopnia jest radialna część równania Schrödingera, której zamieszczony poniżej wariant został wyprowadzony i omówiony w rozdziale 2:

$$\frac{d^2 f(r)}{dr^2} + \left\{ \frac{2\mu}{\hbar} [E - V(r)] - \frac{l^2}{r^2} + \frac{1}{4r^2} \right\} f(r) = 0. \quad (\text{A.8})$$

Powyższe równanie posiada formę możliwą do rozwiązania przy użyciu omawianej metody. Stosując analogię do równania A.1) niebieskim kolorem oznaczono odpowiednik funkcji $u(x)$, zaś funkcja $g(x)$ jest funkcją zerową.

Przy znanym potencjale definiującym $V(r)$ oraz liczbach kwantowych n i l do rozwiązania równania wystarczy narzucić wartości funkcji falowej na początku układu, czyli $f(0)$ oraz $f(\delta r)$. Potrzebna będzie również energia, którą otrzymujemy dzięki metodom bisekcji lub strzałów [67], zakładając, że funkcja falowa znika poza układem.

Algorytm Lanczosa

Algorytm Lanczosa [68] jest przybliżoną metodą znajdowania wartości i wektorów własnych macierzy poprzez przejście do bazy, w której macierz ma postać trójdagonalną np. (A.9), tzn. taką, w której wartości niezerowe występują tylko na głównej przekątnej oraz przekątnych znajdujących się bezpośrednio pod i nad nią, przy czym elementy leżące na subdiagonalnej i superdiagonalnej są sobie równe. Przykładowa macierz trójdogonalna otrzymana dzięki tej metodzie znajduje się poniżej.

$$T_N = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

Na wejściu algorytmu należy podać macierz Hermitowską H o wymiarach $n \times n$, losowe wektory o normie 1 (v_1 oraz β i $v_0=0$) oraz liczbę iteracji m , zazwyczaj znacznie mniejszą od n^2 . Ogólny schemat iteracji po i w zakresie 1 do $m - 1$ przedstawia się w poniższy sposób:

$$\begin{aligned} w_j &\leftarrow H v_j \\ \alpha_j &\leftarrow w_j \times v_j \\ w_j &\leftarrow w_j - \alpha_j v_j - \beta_j v_{j-1} \\ \beta_{j+1} &\leftarrow \|w_j\| \\ v_{j+1} &\leftarrow w_j / \beta_{j+1} \end{aligned}$$

gdzie w_j jest wektorem roboczym. Po zakończeniu wszystkich iteracji:

$$\begin{aligned} w_m &\leftarrow H v_m \\ \alpha_m &\leftarrow w_m \times v_m \end{aligned}$$

Otrzymana w ten sposób macierz trójdzielna może zostać zdiagnozowana przy pomocy procedur znajdujących się w bibliotekach, np. w bibliotece LAPACK.

Zapis dwuwymiarowego równania Shrödingera w formie macierzowej omówiony został w rozdziale 2. Hamiltonian jest macierzą rzadką (*sparse matrix*), co pozwala zastąpić mnożenie macierzy (dla każdego rzędu macierzy, tylko 5 elementów jest niezerowych) sumą iloczynów odpowiednich elementów wektora i macierzy, tym samym skracając czas obliczeń.

Dodatek B

Absorpcja fotonów

Inżynieria funkcji falowych pozwala na manipulację transparentnością układu od niemal przezroczystego do wysoce absorpcyjnego [46]. W odróżnieniu od kropek kwantowych, zarówno absorpcja jak i częstotliwość pochłanianej fali są silnie zależne od napięcia na bramce. Uwzględniając selektywną absorpcję DRN można zastosować jako detektor promieniowania (dla DRN o promieniu 80 nm wykonanego z arsenku indu) z zakresu dalekiej podczerwieni i mikrofal.

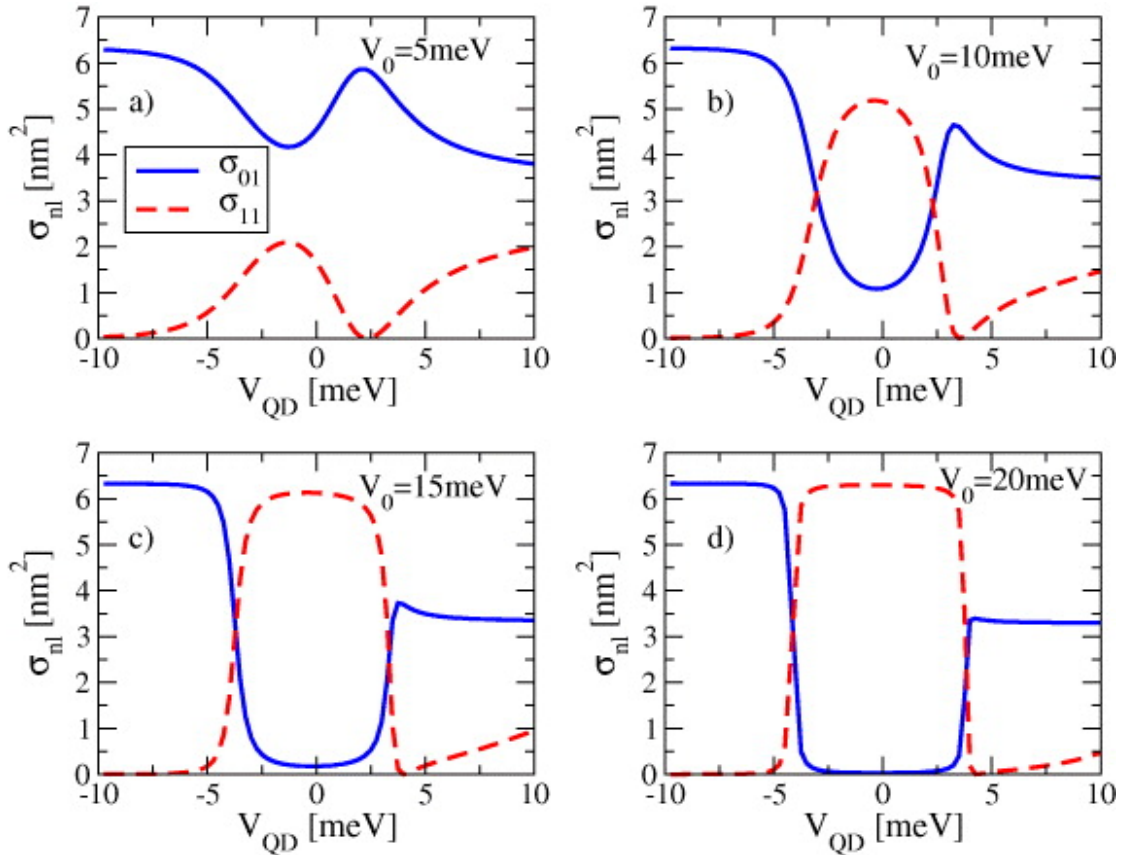
W przybliżeniu dipolowym przekrój czynny na absorpcję fotonu o częstotliwości odpowiadającej odległości poziomów $\hbar\omega \approx \Delta_{nl} = E_{nl} - E_{00}$ można wyrazić wzorem [139–141]:

$$\sigma_{n,l} = \frac{16\pi^2\beta\hbar\omega\Xi_{nl}^2}{n_2}\delta(E_{nl} - E_{00} - \hbar\omega)F_{FD}(E_{nl}E_{00}), \quad (\text{B.1})$$

gdzie β jest stałą struktury nadsubtelnej i wynosi $1/137$, n_2 jest czynnikiem refrakcji, F_{FD} funkcją rozkładu Fermiego - Diraca. Po zaniedbaniu wpływu temperatury i zastąpieniu delty Diraca funkcją Lorentza, wzór na maksymalny przekrój czynny zostaje uproszczony do:

$$\sigma_{i,f} = \frac{16\pi^2\beta\hbar\omega\Xi_{nl}^2}{n_2}\Delta_{n1}. \quad (\text{B.2})$$

Czynnikiem determinującym przekrój czynny jest nakładanie się funkcji falowych (Ξ_{n1}). Czynnikiem ten zależy od V_{QD} . Gdy obydwa stany znajdują się w kropce (pierścieniu) układ absorbuje fotony z dużym prawdopodobieństwem (rysunek B.1). Przestrzenne odseparowanie stanów powoduje zmniejszenie przekroju czynnego nawet czterdziestokrotnie.



RYSUNEK B.1: Przekrój czynny jako funkcja V_{QD} dla różnych wartości V_0 [46]

Im wyższa bariera pomiędzy kropką kwantową a pierścieniem, tym bardziej odseparowane są od siebie stany i tym większy jest stosunek przekroju czynnego pomiędzy stanem przezroczystym a nietransparentnym (rysunek B.1).

Dodatek C

Korelacje elektronowe

Funkcje falowe DRN są ściśle zależne od parametrów definiujących układ. Nawet drobne zmiany w potencjale definiującym mogą doprowadzić do drastycznych zmian w rozkładzie funkcji falowych, np. do przesunięcia maksimum funkcji z pierścienia do kropki, bądź separacji stanów [46]. W związku z tym model stałego oddziaływania (opisany w rozdziale 2) nie jest dobrym przybliżeniem [142], ponieważ zakłada on, że kolejne stany nieznacznie różnią się odpowiadającymi im funkcjami falowymi [17]. W związku z tym konieczne było zastosowanie innego podejścia.

Pierwszym krokiem do wyliczenia energii stanów dwu i trójelektronowych (rysunek C.1), a także profili gęstości, jest stworzenie bazy składającej się ze stanów jednoelektronowych. Zostają one następnie użyte do zdefiniowania operatorów pola:

$$\Psi_{\sigma}(r) = \sum_{i=1; \sigma=\pm 1}^M \psi_{i\sigma}(r) \hat{c}_{i\sigma}, \quad (\text{C.1})$$

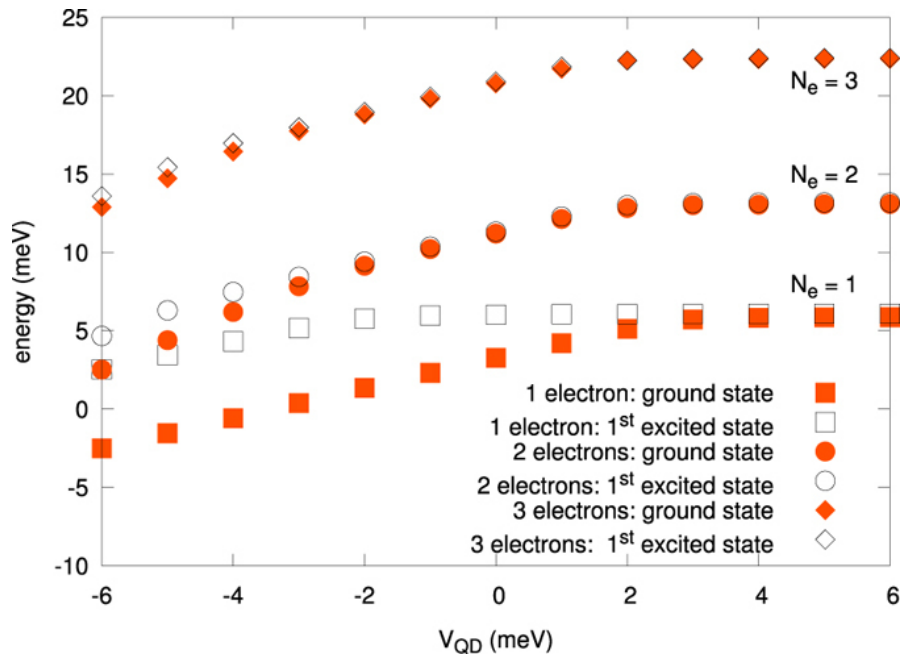
gdzie $\hat{c}_{i\sigma}$ jest operatorem anihilacji cząstki w jednoelektronowym stanie $|\psi_{i\sigma}(r)\rangle$ oraz zdefiniowania Hamiltonianu:

$$\begin{aligned}
H &\equiv \sum_{\sigma} \int d^3r \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) H_1 \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \iint d^3r d^3r' \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}') \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) \\
&= \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} \hat{c}_{i2}^{\dagger} \hat{c}_{j2} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\sigma, \sigma'} V_{ijkl} \hat{c}_{i2}^{\dagger} \hat{c}_{j3}^{\dagger} \hat{c}_{l3} \hat{c}_{k2},
\end{aligned} \tag{C.2}$$

gdzie H_1 jest Hamiltonianem dla jednego elektronu, a t_{ij} i V_{ijkl} są mikroskopowymi parametrami w bazie $\psi_{i\sigma} \equiv \psi_i \chi_{\sigma}$, które są wyliczane numerycznie. Z uwagi na ortogonalność stanów ($\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij}$) pierwszy człon równania zawiera tylko elementy diagonalne $t_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$. Drugi człon odpowiada za oddziaływania pomiędzy elektronami i dla DRN otrzymanego przez epitaksjalny wzrost, bądź z nanodrutu można go wyrazić następujący sposób:

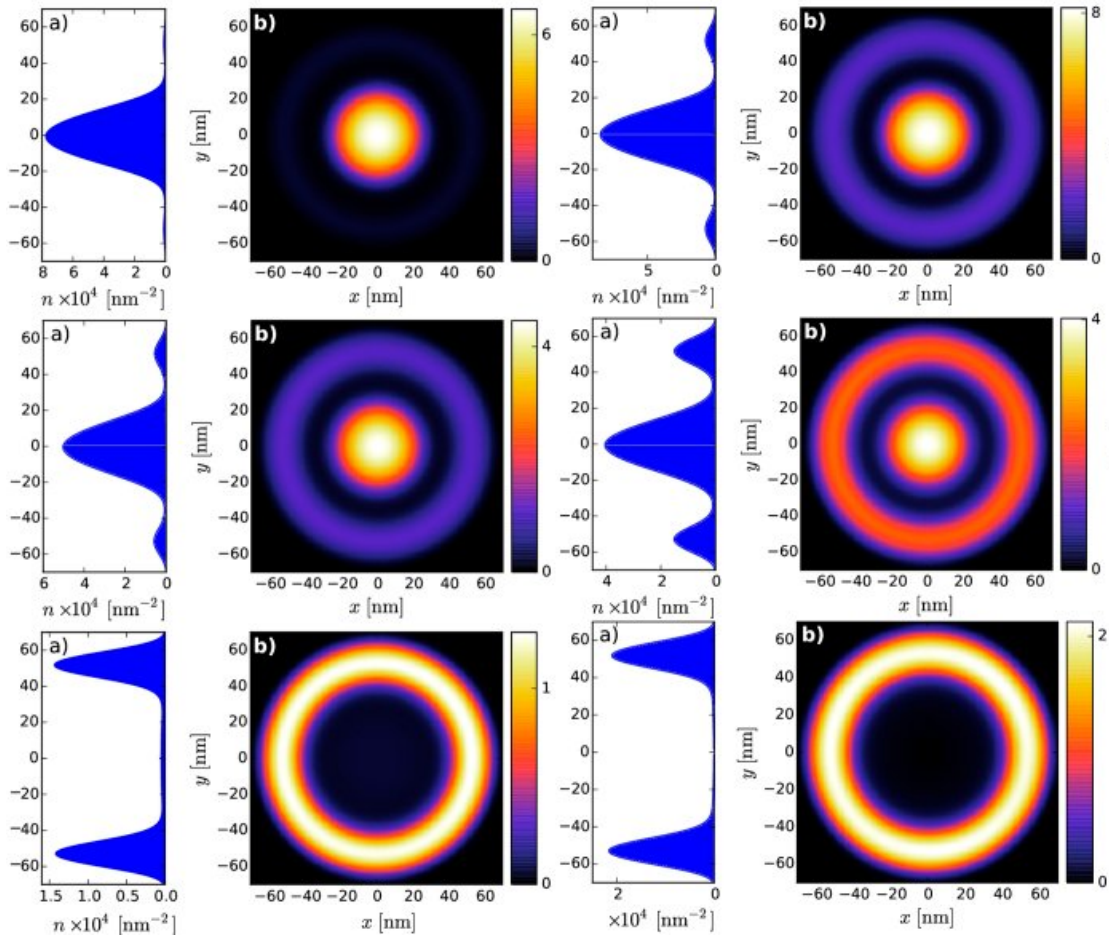
$$V_{ijkl} \equiv \langle \psi_i(r) \psi_j(r') | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon|r - r'|} | \psi_k(r) \psi_l(r') \rangle. \tag{C.3}$$

gdzie ekranowanie zostało uwzględnione przez stałą dielektryczną ϵ . Dla DRN otrzymanego przez zastosowanie układu elektrod należy uwzględnić wpływ ich na oddziaływanie międzyelektronowe.



RYSUNEK C.1: Spektrum energii wieloelektronowych stanów [142].

Kolejnym etapem jest diagonalizacja Hamiltonianu w przestrzeni Focka. Oddziaływanie kulombowskie ma charakter odpychający, mimo to dla odpowiednio niskich bądź wysokich wartości V_{QD} dla elektronów energetycznie korzystniejsze jest zajęcie tej samej części struktury czyli kropki (pierścienia) [podpunkt b) lewego górnego (dolnego) panelu rysunku C.2]. Dla V_{QD} zbliżonych do zera, jeden z elektronów znajduje się w pierścieniu, drugi w kropce. W przypadku trzech elektronów bez względu na to jak niski potencjał ma kropka kwantowa, przynajmniej jeden elektron znajduje się w pierścieniu (podpunkty b) prawych paneli rysunku C.2), przy odpowiednio wysokim potencjale wszystkie elektrony znajdują się w pierścieniu. Wynika to z geometrii, rozmiar kropki kwantowej jest mały w porównaniu do pierścienia, stąd odpychanie pomiędzy elektronami w kropce jest silniejsze, co przekłada się na zwiększony koszt energetyczny.



RYSUNEK C.2: Profile gęstości elektronowych dla różnych wartości V_{QD} dla 2 (lewa) i 3 (prawa) elektronów [142].

Zwiększenie liczby elektronów zmienia zachowanie układu DRN. Inżynieria funkcji falowych z rozdziału 2 może być zastosowana wobec układów dwuelektronowych, a także posłużyć wyliczenia transportu przez układy wieloelektronowe [109]. W przypadku dodania trzeciego i kolejnych elektronów różnice w funkcjach falowych stają się coraz mniejsze z uwagi na wyraźne "przelanie się" funkcji falowej do pierścienia [142].

Bibliografia

- [1] M. V. Ivanov and P. Schmelcher. Electronic transmission through a coupled quantum dot and ring. *J. of Physics: Condensed Matter*, 18:2963, 2006.
- [2] C. Somaschini, S. Bietti, N. Koguchi, and S. Sanguinetti. Shape control via surface reconstruction kinetics of droplet epitaxy nanostructures. *Appl. Phys. Lett.*, 97:203109, 2010.
- [3] N. Koguchi C. Somaschini, S. Bietti and S. Sanguinetti. Coupled quantum dot ring structures by droplet epitaxy. *Nanotechnology*, 22:185602, 2011.
- [4] M. Elborg, T. Noda, T. Mano, T. Kuroda, Y. Yao, Y. Sakuma, and K. Sakoda. Self assembly of vertically aligned quantum ring dot structure by multiple droplet epitaxy. *J. of crystal growth*, 477:239, 2017.
- [5] G. Li, D. Zopf, G. Schmidl, W. Fritzsche, and O. Stranik. Concentric dot ring metal nanostructures prepared by colloidal lithography. *Appl. Phys. Lett.*, 109:163101, 2016.
- [6] M.G. Barseghyan. Electronic states of coupled quantum dot ring structure under lateral electric field with and without a hydrogenic donor impurity. *Physica E*, 69:219, 2015.
- [7] Z. Zeng, C. S. Garoufalis, and S. Baskoutas. Linear and nonlinear optical susceptibilities in a laterally coupled quantum dot quantum ring system. *Physics Letters A*, 378:2713, 2014.

- [8] T. Chakraborty, A. Manaselyan, and M. Barseghyan. Effective tuning of electron charge and spin distribution in a dot ring nanostructure at the znO interface. *Physica E*, 99:63, 2018.
- [9] M. Seel and R. Pandey. Electronic and quantum transport properties of a graphene bn dot ring hetero nanostructure. *Journal of Physics Communications*, 2:045003, 2018.
- [10] G. E. Moore. Cramming more components onto integrated circuits. *Electronics*, 38:114, 1965.
- [11] J. Condliffe. Chip makers admit transistors are about to stop shrinking. *MIT Technology Review*, July 25, 2016.
- [12] A. Wolf, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics a retrospective and perspective. *IBM Journal of Research and Development*, 50:101–110, 2006.
- [13] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnar, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics: a spin based electronics vision for the future. *Science*, 294:1488, 2001.
- [14] M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter, and J.J. Finley. Optically programmable electron spin memory using semiconductor quantum dots. *Nature*, 432:81, 2004.
- [15] D. P. DiVincenzo. The physical implementation of quantum computation. *Fortschritte der Physik*, 48:771, 2000.
- [16] R. Hanson and D. D. Awschalom. Coherent manipulation of single spins in semiconductors. *Nature*, 453:1043, 2008.
- [17] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, and L. M. K. Vandersypen. Spins in few-electron quantum dots. *REVIEWS OF MODERN PHYSICS*, 79:1217, 2007.
- [18] M. A. Kastner. Artificial atoms. *Physics Today*, 46:24–31, 1993.

- [19] R. C. Ashoori. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 379:413–419, 1966.
- [20] A.I.Ekimov, Al.L.Efros, and A.A.Onushchenko. Quantum size effect in semiconductor microcrystals. *Elsevier Solid State Communications*, 56:921–924, 1985.
- [21] A.I. Ekimov and A.A.Onushchenko. Interband light absorption in semiconductor spheres. *Soviet physics*, 16:775–778, 1982.
- [22] R. Rossetti, S. Nakahara, , and L. E. Brus. Quantum size effects in the redox potentials, resonance raman spectra, and electronic spectra of cds crystallites in aqueous solution. *The Journal of Chemical Physics*, 79:1086, 1983.
- [23] L. E. Brus. Electron electron and electron hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state. *The Journal of Chemical Physics*, 80:4403, 1984.
- [24] L. E. Brus. Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory. *The Journal of Chemical Physics*, 90:2555–2560, 1986.
- [25] C. B. Murray, D. J. Noms, , and M. G. Bawendi. Synthesis and characterization of nearly monodisperse cde (e= sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites. *J. of the American chemical society*, 115:8706–8715, 1993.
- [26] Z.Jin, P. Owour, S. Lei, and L. Ge. Graphene, graphene quantum dots and their applications in optoelectronics. *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, 20:439, 2015.
- [27] N. Koguchi, K. Ishige, and S. Takahashi. New selective molecular beam epitaxial growth method for direct formation of gaas quantum dots. *J. of Vacuum Science and Technology B*, 11:787, 1993.
- [28] B. Damilano, J. Brault, and J. Massies. Formation of gan quantum dots by molecular beam epitaxy using nh3 as nitrogen source. *J. of Applied Physics*, 118:024304, 2015.

- [29] S. Franchi, G. Trevisi, L. Seravalli, and P. Frigeri. Quantum dot nanostructures and molecular beam epitaxy. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 47:166, 2003.
- [30] K. Oura, V.G. Lifshits, A. Saranin, A.V. Zotov, and M. Katayama. *Surface Science*, page 452. Springer, 2010.
- [31] D. D. Vvedensky B. A. Joyce. Self organized growth on gaas surfaces. *Materials Science and Engineering R*, 46:127, 2004.
- [32] R. Notzel. Self organized growth of quantum dot structures. *Semiconductor Science and Technology*, 11:1365, 1996.
- [33] T. Mano, T. Kuroda, K. Mitsuishi, M. Yamagiwa, X.-J. Guo, K. Furuya, K. Sakoda, and N. Koguchi. Ringshaped gaas quantum dot laser grown by droplet epitaxy: Effects of post-growth annealing on structural and optical properties. *J. of Crystal Growth*, 301:740, 2007.
- [34] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido, and N. Koguchi. Optical transitions in quantum ring complexes. *Phys. Rev. B*, 72:205301, 2005.
- [35] E. Bauer and Jan H. van der Merwe. Structure and growth of crystalline superlattices: From monolayer to superlattice. *Phys. Rev. B*, 33:3657, 1986.
- [36] A. Baskaran, , and P. Smereka. Mechanisms of stranski krastanov growth. *J. of Applied Physics*, 111:044321, 2012.
- [37] M. C. Harris Liao, Y. H. Chang, Y. F. Chen, , and J. W. Hsu. Fabrication of znse quantum dots under volmer weber mode by metalorganic chemical vapor deposition. *Appl. Phys. Lett.*, 70:2256, 1997.
- [38] F. Donatini and L. S. Dang. A single step electron beam lithography of buried nanostructures using cathodoluminescence imaging and low temperature. *Nanotechnology*, 21:375303, 2010.
- [39] Yang, S.-M., Jang, S. G., Choi, D.-G., Kim, S., Yu, and H. K. Nanomachining by colloidal lithography. *Small*, 2, 2006.

- [40] P. Colson, C. Henrist, , and R. Cloots. Nanosphere lithography: a powerful method for the controlled manufacturing of nanomaterials. *J. of Nanomaterials*, 2013, 2013.
- [41] K. Lis, S. Bednarek, B. Szafran, and J. Adamowski. Electrostatic quantum dots with designed shape of confinement potential. *Physica E*, 17:494, 2003.
- [42] B. Szafran M. Ciurla, J. Adamowski and S. Bednarek. Modelling of confinement potentials in quantum dots. *Physica E*, 15:261, 2002.
- [43] R. C. Ashoori, H. L. Stormer, J. S. Weiner, L. N. PfeiAer, K. W. Baldwin, and K. W. West. N electron ground state energies of a quantum dot in magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 71:613, 1993.
- [44] N. B. Zhitenev, M. Brodsky, R. C. Ashoori, L. N. Pfeiffer, and K. W. West. Localization delocalization transition in quantum dots. *Science*, 285:715, 1999.
- [45] M. Nowak. prywatna korespondencja, 2012-04-26.
- [46] E. Zipper, M. Kurpas, and M. M. Mańska. Wave function engineering in quantum dot ring nanostructures. *New J. Phys.*, 14:093029, 2012.
- [47] T. Palutkiewicz, M. Wołoszyn, P. Wójcik, J. Adamowski, and B.J. Spisak. Influence of geometrical parameters on the transport characteristics of gated core multishell nanowires. *Acta. Phys. Pol. A*, 129A:111, 2016.
- [48] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and Ch. Lieber. Epitaxial core shell and core multishell nanowire heterostructures. *Nature*, 420:57, 2002.
- [49] D. C. Dillen, K. Kim, E. Liu, and E. Tutuc. Radial modulation doping in core shell nanowires. *Nature Nanotechnology*, 9:116, 2014.
- [50] P. N. Hai, L. D. Anh, and M. Tanaka. Electron effective mass in n type electron-induced ferromagnetic semiconductor (in,fe)as: Evidence of conduction band transport. *Appl. Phys. Lett.*, 101:252410, 2012.

- [51] L. D. Anh, P. N. Hai, and M. Tanaka. Control of ferromagnetism by manipulating the carrier wavefunction in ferromagnetic semiconductor (in,fe)as quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, 104:0422404, 2014.
- [52] M. Royo, M. De Luca, R. Rurali, and I. Zardo. A review on iii v core multishell nanowires: growth, properties, and applications. *J. of Physics D: Applied Physics*, 50:143001, 2017.
- [53] A. M. Bagher. Quantum dots applications. *Sensors and Transducers*, 198:37, 2016.
- [54] T.Ihn. *Semiconductor Nanostructures - Quantum states and electronic transport*. Oxford University Press, 2010.
- [55] R. Scheibner. Quantum dot as thermal rectifier. *New Journal of Physics*, 10:083016, 2008.
- [56] Z. Ning, H. Tian, H. Qin, H. Agren, L. Sun, and Y. Fu. Wave function engineering of cdse/cds core/shell quantum dots for enhanced electron transfer to a tio2 substrate. *J. Phys. Chem. C*, 114:15184, 2010.
- [57] D. Lu. *Electron Spin Resonance (ESR) Based Quantum Computing*, page 455. Springer, Berlin Heidelberg, 2016.
- [58] M. Kurpas, E. Zipper, and M. M. Mańska. *Physics of Quantum Rings*, page 455. Springer, Berlin Heidelberg, 2014.
- [59] M. Seo and Y. Chung. Transport properties of a quantum dot and a quantum ring in series. *J. of the Korean Physical Society*, 72:138, 2018.
- [60] H. M. Baghramyan, M. G. Barseghyan, A. A. Kirakosyan, J. H. Ojeda, J. Bragard, and D. Laroze. Modeling of anisotropic properties of double quantum rings by the terahertz laser field. *Sci. Rep.*, 8:6145, 2018.
- [61] M. Kurpas, B. Kedzierska, I. Janus Zygmunt, A. Gorczyca Goraj, E. Wach, E. Zipper, and M. M Mańska. Charge transport through a semiconductor quantum dot ring nanostructure. *J. of Physics Condensed Matter*, 27:265801, 2015.

- [62] T. B. Boykin and G. Klimeck. The discretized schrödinger equation and simple models for semiconductor quantum wells. *Eur. J. Phys.*, 25:503, 2004.
- [63] I. Janus-Zygmunt, B. Kędzierska, A. Gorczyca-Goraj, M. Kurpas, M. M. Maśka, and E. Zipper. Quantum dot ring nanostructure a comparison of different approaches. *International Journal of Modern Physics B*, 30:1642013, 2016.
- [64] Ch. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, , and X. Waintal. Kwant: a software package for quantum transport. *New J. Phys.*, 16:063065, 2014.
- [65] B. V. Numerov. A method of extrapolation of perturbations. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 84:592, 1924.
- [66] B. V. Numerov. Note on the numerical integration of $d^2x/dt^2 = f(x, t)$. *Astronomische Nachrichten*, 230:359, 1927.
- [67] T. Pang. *Metody obliczeniowe w fizyce*. Wydawnictwo naukowe PWN, 2001.
- [68] C. Lanczos. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. *J. Res. Nat. Bur. Stand.*, 45:255, 1950.
- [69] P. Zeeman. The effect of magnetisation on the nature of light emitted by a substance. *Nature*, 55:347, 1897.
- [70] U. Bockelmann and G. Bastard. Phonon scattering and energy relaxation in two, one, and zero dimensional electron gases. *Phys. Rev. B*, 42:8947, 1990.
- [71] G. Piacente and G. Q. Hai. Phonon induced electron relaxation in quantum rings. *Phys. Rev. B*, 75:125324, 2007.
- [72] P. Stano and J. Fabian. Orbital and spin relaxation in single and coupled quantum dots. *Phys. Rev. B*, 74:045320, 2006.
- [73] A. V. Khaetskii and Y. V. Nazarov. Spin flip transitions between zeeman sublevels in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, 64:125316, 2001.

- [74] V. N. Golovach and A. Khaetskii and D. Loss. Phonon induced decay of the electron spin in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 93:016601, 2004.
- [75] D. Heiss, V. Jovanov, F. Klotz, D. Rudolph, M. Bichler, G. Abstreiter, M. S. Brandt, and J. J. Finley. Optically monitoring electron spin relaxation in a single quantum dot using a spin memory device. *Phys. Rev. B*, 82:245316, 2010.
- [76] R. Winkler. *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, page 61. Wiley, 2003.
- [77] J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics 3rd edition*. Springer, 1999.
- [78] R. J. Elliott. Theory of the effect of spin orbit coupling on magnetic resonance in some semiconductors. *Phys. Rev.*, 96:266, 1954.
- [79] V. Galitski and I. B. Spielman. Spin orbit coupling in quantum gases. *Nature*, 494:49, 2013.
- [80] L. H. Thomas. The motion of the spinning electron. *Nature*, 117:117, 1926.
- [81] L. H. Thomas. The kinematics of an electron with an axis. *Phil. Mag.*, 3:1–22, 1927.
- [82] S. Amasha, K. MacLean, P. Iuliana, D. M. Zumbühl, M. A. Kastner, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Electrical control of spin relaxation in a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 100:046803, 2008.
- [83] G. Dresselhaus. Spin orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, 100:580, 1955.
- [84] I. Janus-Zygmunt, B. Kędzierska, A. Gorczyca-Goraj, M. Kurpas, M. M. Mańska, and E. Zipper. Application of the dot ring nanostructure to control electrical transport in the coulomb blockade regime. *Acta. Phys. Pol. A*, 126:1171, 2014.

- [85] G. Q. Hai and S. S. Oliveira. Electron relaxation induced by electron longitudinal acoustic phonon scattering in single and coupled quantum dots in external magnetic and electric fields. *Phys. Rev. B*, 74:193303, 2006.
- [86] R. Schleser, E. Ruh, T. Ihn, K. Ensslin, D. C. Driscoll, and A. C. Gossard. Finite bias charge detection in a quantum dot. *Phys. Rev. B*, 72:035312, 2005.
- [87] T. Fujisawa, Y. Tokura, and Y. Hirayama. Energy relaxation process in a quantum dot studied by dc current and pulse excited current measurements. *Physica B*, 298:573, 2001.
- [88] A. Fuhrer, S. Lscher, T. Ihn, T. Henzel, K. Ensslin, W. Wegscheider, and M. Bichler. Energy spectra of quantum rings. *Nature*, 413:822, 2001.
- [89] R. Scheibner, M. Koenig, D. Reuter, A. D. Wieck, C. Gould, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp. Quantum dot as thermal rectifier. *New J. Phys.*, 10:083016, 2008.
- [90] E. Zipper, M. Kurpas, J. Sadowski, and M. M. Mańska. Spin relaxation in semiconductor quantum rings and dots a comparative study. *J. of Physics: Condensed Matter*, 23:115302, 2011.
- [91] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha. Few electron quantum dots. *Rep. Prog. Phys*, 64:701, 2001.
- [92] R. Ziegler, C. Bruder, and H. Schoeller. Transport through double quantum dots. *Phys. Rev. B*, 62:1961, 2000.
- [93] J. Fransson and O. Eriksson. Current voltage asymmetries and negative differential conductance due to strong electron correlations in double quantum dots. *Phys. Rev. B*, 70:085301, 2004.
- [94] D. Sztenkiel and R. Swirkowicz. Electron transport through double quantum dot system with inter dot coulomb interaction. *Acta Phys. Pol. A*, 111:361, 2007.

- [95] Z. Q. Li H. Chen, J. W. and Y. Kawazoe. Correlated conductance through a lattice of quantum dots: Metal to antiferromagnetic insulator transition. *Phys. Rev. B*, 55:1578, 1997.
- [96] W. Z. Shangguan, T. C. Au Yeung, Y. B. Yu, and C. H. Kam. Quantum transport in a one dimensional quantum dot array. *Phys. Rev. B*, 63:235323, 2001.
- [97] R. Ugajin. Mott metal insulator transition driven by an external electric field in coupled quantum dot arrays and its application to field effect devices. *J. Appl. Phys.*, 76:2833, 1994.
- [98] R. Ugajin. Electric field induced mott metal insulator transition. *Phys. Rev. B*, 53:10141, 1996.
- [99] M. Winzer, M. Kleiber, N. Dix, and R. Wiesendanger. Fabrication of nano dot and nano ring arrays by nanosphere lithography. *Appl. Phys. A*, 63:617, 1996.
- [100] P. Anderson. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.*, 124:41, 1961.
- [101] J. Weis, R. H. Hang, K. v. Klitzing, and K. Ploog. Competing channels in single electron tunneling through a quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 71:4019, 1993.
- [102] J. Bardeen. Tunnelling from a many particle point of view. *Phys. Rev. Lett.*, 6:57, 1961.
- [103] H. J. Reittu. Fermi's golden rule and bardeen's tunneling theory. *Am. J. Phys.*, 63:940, 1995.
- [104] J. Tersoff and D. R. Hamann. Theory and application for the scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1988, 1983.
- [105] J. Tersoff and D. R. Hamann. Theory of the scanning tunneling microscope. *Phys. Rev. B*, 31:805, 1985.

- [106] C. J. Chen. Origin of atomic resolution on metal surfaces in scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 65:448, 1990.
- [107] C. J. Chen. Tunneling matrix elements in three-dimensional space: The derivative rule and the sum rule. *Phys. Rev. B*, 42:8841, 1990.
- [108] T. Fujisawa, Y. Tokura, and Y. Hirayama. Transient current spectroscopy of a quantum dot in the coulomb blockade regime. *Phys. Rev. B*, 63:081304(R), 2001.
- [109] A. Brataas, U. Hanke, and K.A. Chao. Transport through a quantum dot pillar. *Semicond. Sci. Technol.*, 12:825, 1997.
- [110] M. Büttiker. Role of quantum coherence in series resistors. *Phys. Rev. B*, 33:3020, 1986.
- [111] M. Büttiker. Coherent and sequential tunneling in series barriers. *IBM J. Res. Dev.*, 32:63, 1988.
- [112] A. D. Stone and P. A. Lee. Effect of inelastic processes on resonant tunneling in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1196, 1985.
- [113] M. A. Kastner. The single electron transistor. *Rev. Mod. Phys.*, 64:849, 1992.
- [114] L. Zhuang, L. Guo, and S. Y. Chou. Silicon single-electron quantum-dot transistor switch operating at room temperature. *Appl. Phys. Lett.*, 72:1205, 1998.
- [115] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, S. B. Cronin, and A. Gomes Souza Filho. *Transport in Low Dimensional Systems*, page 231. Springer, 2018.
- [116] P. K. Hazaveh, P. L. Bergstrom, and J. A. Jaszczak. Efficient physics based modeling of a representative semiconducting quantum dot single electron device. *Nanotechnology*, 2017 IEEE 17th International Conference:739, 2017.
- [117] M. Stopa. Rectifying behavior in coulomb blockades: charging rectifiers. *Phys. Rev. Lett.*, 88:146802, 2002.

- [118] C. R. Mueller, L. Worschech, S. Lang, M. Stopa, and A. Forchel. Quantized rectification in a quantum dot nanojunction. *Phys. Rev. B*, 80:075317, 2009.
- [119] T. Johnson, L. P. Kouwenhoven, W. de Jong, N. C. de Vaart, C. J. P. M. Harmans, and C. T. Foxon. Zero dimensional states and single electron charging in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 69:1592, 1992.
- [120] D. Weinmann, W. Häsler, and B. Kramer. Spin blockades in linear and nonlinear transport through quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 74:984, 1995.
- [121] K. Ono, D. G. Austing, Y. Tokura, and S. Tarucha. Current rectification by pauli exclusion in a weakly coupled double quantum dot system. *Science*, 297:1313, 2002.
- [122] A. C. Johnson, J. R. Petta, C. M. Markus, M. P. Hanson, , and A. C. Gossard. Singlet triplet spin blockade and charge sensing in a few electron double quantum dot. *Phys. Rev. B*, 72:165308, 2005.
- [123] C. B. Simmons, Teck Seng Koh, Nakul Shaji, Madhu Thalakulam, L. J. Klein, Hua Qin, H. Luo, D. E. Savage, M. G. Lagally, A. J. Rimberg, Robert Joynt, Robert Blick, Mark Friesen, S. N. Coppersmith, and M. A. Eriksson. Pauli spin blockade and lifetime-enhanced transport in a si/sige double quantum dot. *Phys. Rev. B*, 82:245312, 2010.
- [124] H. Kosaka, A.A. Kiselev, F.A. Baron, Ki Wook Kim, and E. Yablonovitch. Electron g factor engineering in iii v semiconductors for quantum communications. *Electronics letters*, 37:464, 2001.
- [125] L. Esaki and L. L. Chang. New transport phenomenon in a semiconductor" superlattice". *Phys. Rev. Lett.*, 33:495, 1974.
- [126] H. C. George, M. Pierre, X. Jehl, A. O. Orlov, M. Sanquer, and Gregory L. Snider. Application of negative differential conductance in al/alox single electron transistors for background charge characterization. *Appl. Phys. Lett.*, 96:042114, 2010.

- [127] A. Nogaret. Negative differential conductance materials for flexible electronics. *J. of Applied Polymer Science*, 131:40169, 2014.
- [128] Der Feng Guo, Chin Chuan Cheng, Kun Wei Lin, Wen Chau Liu, and Wei Lin. A multiple negative differential resistance switch with double ingap barriers. *App. Phys. Lett.*, 69:4185, 1996.
- [129] J. Chen, M. A. Reed, A. M. Rawlett, and J. M. Tour. Large on off ratios and negative differential resistance in a molecular electronic device. *Science*, 286:1550, 1999.
- [130] Y. Wu, D. B. Farmer, Shu Jen Han W. Zhu, C. D. Dimitrakopoulos, A. A. Bol, P. Avouris, and Yu Ming Lin. Three terminal graphene negative differential resistance devices. *ACS Nano*, 6:2610, 2012.
- [131] A. Sibille, J. F. Palmier, F. Mollot, H. Wang, and J. C. Esnault. Negative differential conductance in gaas/alas superlattices. *Phys. Rev. B*, 39:6272, 1989.
- [132] J. Koga and A. Toriumi. Negative differential conductance in three terminal silicon tunneling device. *App. Phys. Lett.*, 69:1435, 1996.
- [133] L. Britnell, R.V. Gorbachev, A.K. Geim, L.A. Ponomarenko, A. Mishchenko, M.T. Greenaway, T.M. Fromhold, K.S. Novoselov, and L. Eaves. Resonant tunnelling and negative differential conductance in graphene transistors. *Nature Communications*, 4:1794, 2013.
- [134] M. Rabiou, S. Y. Mensah, and S. S. Abukari. Appearance of negative differential conductivity in graphene nanoribbons at high harmonics. *Graphene*, 2:61, 2013.
- [135] Jr. J. M. Pereira, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters. Graphene-based resonant tunneling structures. *App. Phys. Lett.*, 90:132122, 2007.
- [136] B. Kedzierska, A. Gorczyca-Goraj, and M. M. Mańska E. Zipper. Tunable spin dependent transport in the dot ring nanostructure. *International Journal of Modern Physics B*, 0:1840029, 2018.

- [137] M. Ciorga, M. Pioro-Ladriere, P. Zawadzki, P. Hawrylak, and A. S. Sachrajda. Tunable negative differential resistance controlled by spin blockade in single electron transistors. *Appl. Phys. Lett.*, 80:2177, 2002.
- [138] V.I.Tselyaev. A generalized numerov method for linear second order differential equations involving a first derivative term. *J. of Computational and Applied Mathematics*, 170:103, 2004.
- [139] V. Milanovic and Z.Ikonic. Intraband absorption of infrared radiation in a semiconductor quantum dot. *Phys. Rev. B*, 39:7982, 1989.
- [140] V. Halonen, P. Pietilinen, and T. Chakraborty. Optical absorption spectra of quantum dots and rings with a repulsive scattering centre. *Europhys. Lett.*, 33:377, 1996.
- [141] V. Bondarenko and Y. Zhao. Resonant photoionization absorption spectra of spherical quantum dots. *J. Phys.: Condens. Matter*, 15:1377, 2003.
- [142] A. Biborski, A. P. Kadzielawa, A. Gorczyca-Goraj, E. Zipper, M. M. Maska, and J. Spalek. Dot ring nanostructure: Rigorous analysis of many-electron effects. *Sci. Rep.*, 6:29887, 2016.